

Том 165, Выпуск 6

ISSN 0044-4510
Июнь 2024



ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ



НАУКА
— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 165, ВЫПУСК 6

ИЮНЬ 2024

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Роль нефелоксетического эффекта для иона Fe^{2+} в матрицах селенида цинка и теллурида кадмия Кривобок В.С., Аминев Д. Ф., За- зымкина Д. А., Ушаков В. В., Нариц А. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В.	757
Сравнение излучения электрона в линейно и циркулярно поляризованных гауссовых полях Боровский А. В., Галкин А. Л.	767
Электромеханические автоколебательные системы с гибкими автоэлектронными эмиттерами Клещ В. И., Образцов А. Н.	776
Молекулы из отталкивающихся атомов, адсорбированных на поверхности и нити Максимычев А. В., Меньшиков Л. И., Меньшиков П. Л.	784

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Поляризационные свойства черных дыр и кротовых нор Чернов С. В.	788
Generalized Einstein–Rosen bridge inside black holes Dokuchaev V. I., Prokopen K. E.	800

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Механизмы диффузии железа в α -Ti Горев Н. Д., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.	807
Особенности поляризованной люминесценции неоднородного ансамбля локализованных экситонов Котова Л. В., Кочерешко В. П.	818

© Российская академия наук, 2024

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2024

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

Влияние облучения ионами Хе с энергией 167 МэВ на сверхпроводящие свойства ВТСП-лент второго поколения	827
Дегтяренко П. Н., Скуратов В. А., Васильев А. Л., Овчаров А. В., Петржик А. М., Семина В. К., Гаврилкин С. Ю., Новиков М. С., Малявина А. Ю., Амеличев В. А., Цветков А. Ю.	

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Quantum transport through the graphene-silicene nanoribbons junction	833
..... Najarsadeghi M., Fouladi A. A., Rostami A. Z., Pahlavan A.	
Захват электронов и дырок на состояния вакансий ртути с испусканием одиночного оптического фонона при рекомбинации Шокли – Рида – Холла в узкозонных твердых растворах HgCdTe ...	840
... Козлов Д. В., Румянцев В. В., Янцер А. А., Морозов С. В., Гавриленко В. И.	

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА,
ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ**

Нелинейные колебания слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле в рамках маломодового приближения	848
..... Некрасов О. О., Картавых Н. Н.	
Диэлектрические и плазменно-диэлектрические черенковские усилители субтерагерцового диапазона на релятивистских электронных пучках большой плотности	857
..... Ершов А. В., Карташов И. Н., Кузелев М. В.	
Модель солитонной турбулентности высокочастотных флуктуаций частично замагниченной плазмы	870
..... Ковалева И. Х., Ковалев А. Т.	
Изучение плотной плазмы свинца . . .	876
Апфельбаум Е. М., Кондратьев А. М., Рахель А. Д.	
Алфавитный указатель тома 165 за 2024 г.	889
Предметный указатель тома 165 за 2024 г.	897

РОЛЬ НЕФЕЛОКСЕТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ ИОНА Fe^{2+} В МАТРИЦАХ СЕЛЕНИДА ЦИНКА И ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ

В.С. Кривобок^{a,b*}, Д. Ф. Аминев^a, Д. А. Зазымкина^a, В. В. Ушаков^a, А. А. Нарич^a,
В. И. Козловский^a, Ю. В. Коростелин^a

^a Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 12 сентября 2023 г.,
после переработки 23 января 2024 г.
Принята к публикации 29 января 2024 г.

Для электронной подсистемы ионов переходных металлов, встроенных в кристаллическую решетку или сформировавших комплекс с лигандами, наблюдается эффективное уменьшение межэлектронного отталкивания по сравнению со свободными ионами, которое в современной литературе упоминается как нефелоксетический эффект. В данной работе исследуется роль нефелоксетического эффекта при формировании электронного спектра ионов Fe^{2+} в матрицах CdTe и ZnSe. Экспериментальная оценка соответствующих поправок осуществлена на основе анализа двух переходов — хорошо известного ${}^5\text{T}_2({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$, позволяющего зафиксировать величину кристаллического поля, и менее изученного ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$. Обнаружение бесфонной линии данного перехода в CdTe:Fe позволило сравнить свойства двух люминесцентных систем и продемонстрировать, что для иона Fe^{2+} в CdTe роль нефелоксетического эффекта заметно возрастает. На основе полученных экспериментальных данных в сочетании с расчетами в рамках теории кристаллического поля уточнены значения параметров Рака для ионов Fe^{2+} в матрицах CdTe и ZnSe. Продемонстрированная в работе роль нефелоксетического эффекта для ионов Fe^{2+} в двух схожих по структуре матрицах важна как для практических задач, связанных с совершенствованием ИК-лазерных систем, так и для разрешения некоторых фундаментальных вопросов квантовой химии.

DOI: 10.31857/S0044451024060014

1. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводники группы II-VI с кубической структурой, легированные переходными элементами, находят широкое применение при создании перестраиваемых [1] и импульсных [2] лазеров среднего ИК-диапазона. Дальнейший прогресс лазерных технологий, направленный на совершенствование имеющихся лазерных систем [3, 4] или разработку новых подходов для получения лазерной генерации [5], требует более детального понимания механизмов формирования электронного спектра ионов переходных элементов в кристаллических

матрицах. Среди них наибольшее внимание уделяется железу и хрому [6–8]. Последовательное решение данной задачи могло бы опираться на современные расчеты *ab-initio*, которые позволяют установить не только структуру и электронный спектр люминесцентных центров, но и изучить возможные сценарии их образования [9]. Тем не менее к настоящему моменту возможности данного подхода часто оказываются весьма ограниченными вследствие того, что для внедренных ионов переходных элементов велико влияние как корреляции межэлектронного движения, так и существование большого числа альтернативных электронных конфигураций, вносящих вклад в полную электронную плотность [10]. В этом контексте большое внимание уделяется обсуждению многоэлектронных поправок в рамках теории кристаллического поля, в частности, обсуждается роль так называемого нефелоксетического эффекта [11, 12].

* E-mail: kolob7040@gmail.com

С точки зрения теории кристаллического поля нефелоксетический эффект проявляется как эффективное уменьшение параметров Рака (B , C), определяемых структурой электронных оболочек, при переходе от свободного иона к иону, встроеному в кристаллическую решетку [12]. Данную тенденцию можно трактовать как эффективное уменьшение отталкивания между электронами. Иначе говоря, при наличии окружения возникает поправка, обусловленная многоэлектронными эффектами, физический смысл которой можно качественно описать как делокализацию одноэлектронных орбиталей и взаимодействие электронов центра с окружением. Соответственно, экспериментальное исследование нефелоксетического эффекта позволяет не только уточнить параметры электронного спектра излучательного центра, но и дать некоторую количественную оценку роли корреляции многоэлектронного движения, возникающей из-за наличия лигандов. Последнее обстоятельство представляет значительный интерес, в частности, для установления точности активно развиваемых теоретических подходов [13], сочетающих в себе удобство формулировки, присущее теории лигандного поля [14], с высокоточными методами квантовой химии [15, 16], позволяющих дать самосогласованное описание корреляционных эффектов и вкладов спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий.

Несмотря на активное изучение нефелоксетического эффекта для целого ряда химических соединений [11, 17], его роль остается малоизученной для ионов переходных элементов в кристаллических матрицах, в том числе для практически важного случая полупроводников группы II-VI с кубической структурой. Экспериментальные исследования материалов данной группы осложняются тем, что оказывается необходимой спектроскопическая информация о нескольких (по крайней мере двух) переходах с участием разных электронных оболочек. Данная особенность определяется тем, что для фиксации нефелоксетического эффекта в рамках теории кристаллического поля необходимо определить как саму величину кристаллического поля (Dq), так и точные значения параметров Рака (B , C). Отличие данных параметров от значений, характерных для свободного иона, и будет определять роль нефелоксетического эффекта.

В последнее время для количественного описания нефелоксетического эффекта используется параметр [11]

$$\beta_1 = \sqrt{\left(\frac{B}{B_0}\right)^2 + \left(\frac{C}{C_0}\right)^2}, \quad (1)$$

где B , C — параметры Рака для иона в кристаллической решетке, а B_0 , C_0 — параметры Рака для свободного иона. Считается, что при $\beta_1 \sim 1$ роль нефелоксетического эффекта второстепенна и становится существенной, если β_1 заметно меньше единицы [12]. В случае кубических полупроводников II-VI одной из перспективных систем для исследования нефелоксетического эффекта являются ионы железа в селениде цинка [18, 19]. Это связано с тем, что для оптически активного иона Fe^{2+} в ZnSe известны по крайней мере два разных перехода с хорошо исследованной тонкой структурой: ${}^5\text{T}_2 ({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E} ({}^5\text{D})$ [19, 20] и ${}^3\text{T}_1 ({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E} ({}^5\text{D})$ [21]. Первый переход позволяет определить роль кристаллического поля, в то время как второй — определить диапазон допустимых значений параметров Рака и оценить роль нефелоксетического эффекта.

Наряду с хорошо известным ZnSe:Fe интерес вызывает близкая по свойствам система CdTe:Fe , также имеющая кубическую решетку, но характеризующаяся большим значением постоянной решетки, меньшим значением параметра Dq и, по-видимому, более существенной ролью многоэлектронных эффектов. Последнее определяется тем, что матричные компоненты Cd и Te существенно тяжелее Zn и Se [22]. Для CdTe:Fe тонкая структура перехода ${}^5\text{T}_2 ({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E} ({}^5\text{D})$ исследована в работе [23]; переход ${}^3\text{T}_1 ({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E} ({}^5\text{D})$ в этой системе ранее не исследовался.

В данной работе на основе измерений низкотемпературной фотолуминесценции мы идентифицировали переход ${}^3\text{T}_1 ({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E} ({}^5\text{D})$ для системы CdTe:Fe . Полученные данные позволили экспериментально определить значение параметра β_1 для данной системы и экспериментально продемонстрировать разную роль многоэлектронных поправок, определяющих нефелоксетический эффект для внутренних оболочек иона Fe^{2+} , в матрицах CdTe и ZnSe . Полученная в работе оценка нефелоксетического эффекта может помочь не только в разработке ИК-лазерных систем, но и при разрешении некоторых общих вопросов, связанных с многоэлектронными эффектами в квантовомеханических расчетах.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследований были отобраны образцы поликристаллического ZnSe, легированные Fe^{2+} методом термодиффузии, которые демонстрировали параметры лазерной генерации, близкие к рекордным [24]. Данные образцы в форме параллелепипедов были вырезаны из поликристаллической друзы с однородной микроструктурой. Затем на поверхность образцов наносилась пленка железа, и образцы подвергались отжигу в атмосфере Ar при температуре 1000–1100°C в течение 240 ч. Для измерений люминесценции использовались грани параллелепипедов, расположенные перпендикулярно к поверхности, на которую наносилась пленка железа. Вдоль данных граней наблюдался заметный градиент концентрации легирующего железа [25]. Структурная и оптическая характеристика выбранных образцов ZnSe:Fe описаны в работе [26].

Кристалл CdTe лазерного качества, легированный железом, был выращен в ФИАН при помощи оригинального метода [27]. Методика основана на парофазном переносе примесей в атмосфере He в процессе свободного роста кристалла. Основными особенностями технологии является использование двух отдельных источников — поликристаллического материала II-IV и примеси, а также индивидуальный контроль скорости потока материалов II-IV и легирующей примеси. Исследованный кристалл был вырезан из булы, выращенной в атмосфере He при температуре 1250 К. Во время охлаждения печи булы отжигалась 24 часа при температуре 1080 К. Концентрация ионов железа составляла $4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Измерения низкотемпературной фотолюминесценции (ФЛ) образцов проводились в широком спектральном диапазоне от 0.9 до 5.5 мкм (1.4–0.22 эВ). Для измерения спектров в ближнем ИК-диапазоне до 1.1 мкм использовалась установка на основе монохроматора Acton (Princeton Instruments) с охлаждаемой кремниевой матрицей. Для работы в области больших длин волн использовалась установка на основе модернизированного монохроматора ИКС-31 со сменными дифракционными решетками. В схеме регистрации использовались различные приемники, обеспечивающие максимальную чувствительность в своем диапазоне. В спектральной области 1–1.7 мкм для регистрации сигнала использовался фотоэлектронный умножитель Hamamatsu H10330B-75, работающий в режиме счета фотонов. В диапазоне 1.1–2.4 мкм использовался охлаждаемый фотоди-

од InGaAs с трансимпедансным предусилителем (с охлаждаемым сопротивлением). В среднем инфракрасном диапазоне применялся охлаждаемый КРТ-приемник MCT D313. Для регистрации фотоотклика фотодиода InGaAs и КРТ-приемника мы применяли синхронное детектирование, реализованное на основе синхронного детектора Princeton instruments SR 830.

Для возбуждения ФЛ-переходов с уровня ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H})$ в ZnSe:Fe использовалась вторая гармоника твдотельного Nd:YAG-лазера с длиной волны 532 нм. Такое возбуждение позволяет эффективно заселяет уровень ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H})$ [21]. Также при таком возбуждении заселенность уровня ${}^5\text{T}_2({}^5\text{D})$ будет определяться переходом ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{T}_2({}^5\text{D})$, а интенсивность ФЛ-линии ${}^5\text{T}_2({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$ будет сравнительно невысокой. Поэтому для возбуждения ФЛ-перехода ${}^5\text{T}_2({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$ эффективнее использовать лазер с энергией кванта меньше энергии перехода ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$. Мы использовали полупроводниковый InGaAs-лазер с длиной волны возбуждения 995 нм и мощностью 200 мВт. Тот же лазер использовался для возбуждения основного ФЛ-перехода в образце CdTe:Fe. Для возбуждения люминесценции с лежащих выше состояний использовался полупроводниковый InGaAl-лазер с длиной волны излучения 660 нм. В данном лазере реализована возможность управления излучением при помощи внешнего сигнала. Это позволяет при помощи генератора импульсов реализовать импульсное возбуждение образца и, таким образом, измерять кинетику люминесценции. Для управления полупроводниковым лазером 660 нм мы использовали генератор импульсов Г5–72. В подавляющем большинстве случаев была выбрана длительность импульса 200 мкс, частота следования импульсов 480 Гц. Данный режим выбран для регистрации относительно долговременных спадов ФЛ, характерных для внутрицентровых переходов. Ширина фронта импульса не превышала 100 нс, что вполне достаточно для измерения сравнительно медленной кинетики люминесценции Fe^{2+} при гелиевых температурах.

3. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ Fe^{2+} В CdTe И ZnSe

Фрагменты спектров низкотемпературной фотолюминесценции исследуемых образцов, демонстрирующие внутрицентровые переходы Fe^{2+} в CdTe и ZnSe, представлены на рис. 1. Свободный ион желе-

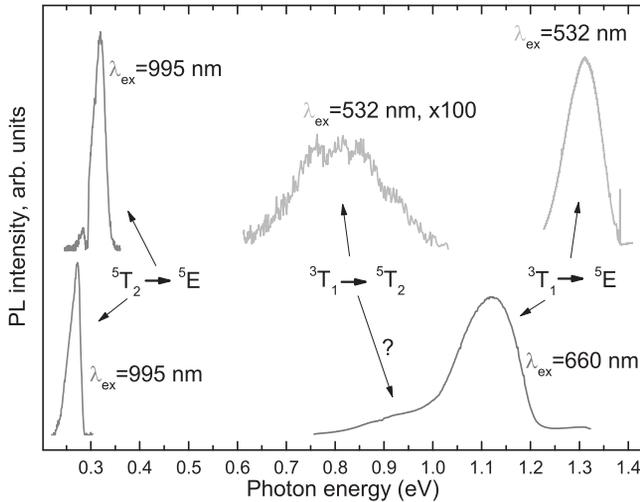


Рис. 1. Обзорные спектры низкотемпературной фотолюминесценции для ионов Fe^{2+} в кристаллах ZnSe (сверху) и CdTe (снизу) при температуре 7 К. Используемые длины волн возбуждения приведены на рисунке

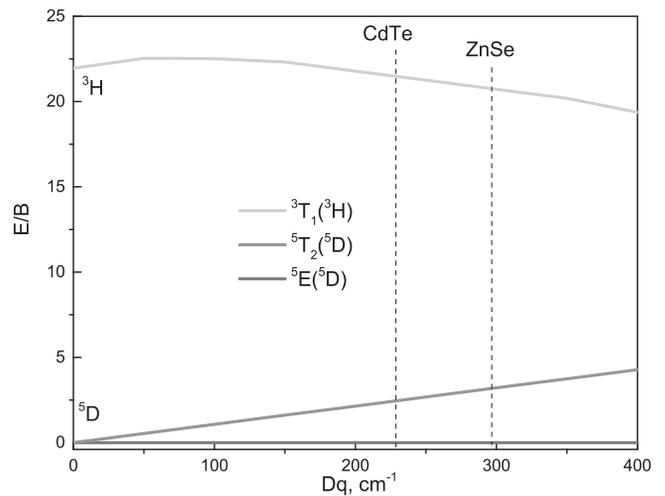


Рис. 2. Схема расщепления энергетических 3H - и 5D -уровней Fe^{2+} в тетраэдрическом поле (диаграмма Танабе–Сугано). Вертикальные пунктирные линии соответствуют значением параметра Dq для CdTe и ZnSe

за Fe^{2+} имеет конфигурацию d^6 основным состоянием которого является 5D , а первым возбужденным — 3H . В данной работе обсуждается спектр ионов Fe^{2+} , замещающих Zn (Cd) в решетке ZnSe (CdTe). В этом случае примесь находится в тетраэдрическом поле, которое вызывает расщепление исходных уровней, см. рис. 2. Из теории кристаллического поля, подтвержденной экспериментальными исследованиями электронного спектра, см., например, [19], следует, что при учете только электрического поля основное состояние 5D расщепляется на два термина, 5E и 5T_2 , а возбужденный терм расщепляется на три уровня, $^3H \rightarrow ^3T_1, ^3E, ^3T_2$. Переход между нижними уровнями $^5T_2(^5D) \rightarrow ^5E(^5D)$, хорошо изучен. Как для CdTe:Fe [23], так и для ZnSe [19] разрешается серия бесфоновых линий, которые позволяют довольно точно определить энергетический сдвиг между уровнями 5E и 5T_2 .

Еще из ранних работ для ZnSe:Fe известна широкая полоса излучения с максимумом в районе 980 нм [18]. Эксперименты с оптическим детектированием магнитного резонанса однозначно указывают на связь данной полосы с переходом $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5E(^5D)$ иона Fe^{2+} [18]. Недавно использование низких температур в сочетании с кристаллами ZnSe:Fe высокого качества позволило зарегистрировать шесть бесфоновых компонент тонкой структуры для перехода $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5E(^5D)$, ширина каждой из которых не превышает 0.3 мэВ [28]. Само наличие данных компонент исключает заметную роль неадиа-

батических эффектов, их количество указывает на тетраэдрическую координацию иона Fe^{2+} , а энергетическое положение обеспечивает возможность более или менее корректного восстановления параметров Рака в матрице ZnSe. В свою очередь, переход $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5T_2(^5D)$ на первый возбужденный подуровень обсуждался в работах [21, 28]. Положение синей границы для соответствующей линии излучения согласуется со структурой электронного спектра, вытекающей из спектроскопии переходов $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5E(^5D)$ и $^5T_2(^5D) \rightarrow ^5E(^5D)$. Характерные времена затухания сигнала люминесценции для переходов $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5E(^5D)$ и $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5T_2(^5D)$, определяемые релаксацией из состояния $^3T_1(^3H)$, порядка сотни микросекунд [29].

Для кристаллов ZnSe, исследованных в данной работе, спектр люминесценции, соответствующий переходу $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5T_2(^5D)$, показан в центре верхней части рис. 1. Тонкая структура спектра в области, соответствующей бесфоновым компонентам перехода $^3T_1(^3H) \rightarrow ^5E(^5D)$, показана отдельно на рис. 3. Наличие нескольких бесфоновых пиков в области 1.379–1.387 эВ определяется расщеплением состояний $^3T_1(^3H)$ и $^5E(^5D)$ за счет спин-орбитального взаимодействия первого и второго порядков [28]. Спектральные положения бесфоновых линий систематизированы в табл. 1.

В отличие от ZnSe, для теллурида кадмия ранее уверенно был зарегистрирован только переход $^5T_2(^5D) \rightarrow ^5E(^5D)$ [23]. Тонкая структура этого пе-

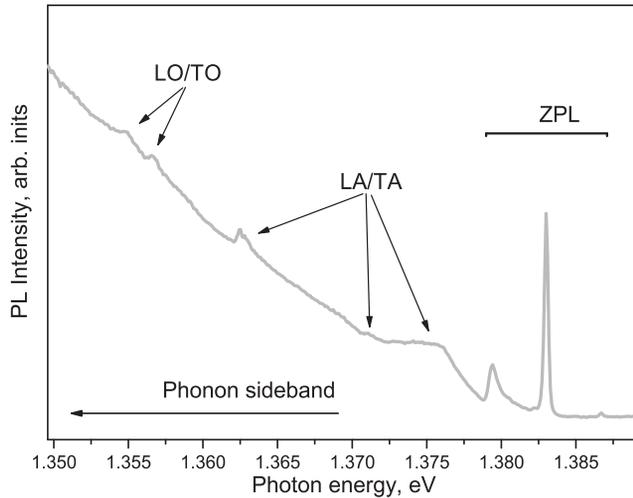


Рис. 3. Тонкая структура спектра излучения для кристалла ZnSe:Fe в области бесфононного (ZPL) перехода ${}^3T_1({}^3H) \rightarrow {}^5E({}^5D)$ при температуре 5 К. Для возбуждения ФЛ используется излучение с длиной волны 532 нм. LO/TO и LA/TA обозначают фононные повторения с участием соответственно оптических и акустических фононов

рехода указывает на то, что, как и в ZnSe, координация иона Fe^{2+} близка к тетраэдрической. Следовательно, длинноволновый сдвиг перехода ${}^5T_2({}^5D) \rightarrow {}^5E({}^5D)$ [23] в CdTe по сравнению с ZnSe определяется уменьшением величины расщепления кристаллическим полем (параметр Dq). Для исследованных кристаллов CdTe:Fe линия излучения, соответствующая переходу ${}^5T_2({}^5D) \rightarrow {}^5E({}^5D)$, показана на рис. 1 внизу слева.

В работе [30] упоминается о возникновении новых полос излучения с максимумами излучения 1.13 и 1.03 эВ, после имплантации железа в CdTe и последующего отжига. В этой работе также приведена оценка времени затухания излучения 30 мкс, что позволяет сделать вывод о связи этих полос с внутрицентровыми переходами ионов железа. Однако о природе соответствующего центра никаких предположений в [30] высказано не было.

Как видно на рис. 1, в исследованных кристаллах CdTe:Fe полоса излучения 1.2–0.75 эВ имеет сложную форму и можно предположить, что она образована наложением двух полос — более интенсивной с максимумом 1.1 эВ и менее интенсивной с максимумом около 0.9 эВ. Данное предположение строится на аналогии со спектром излучения Fe^{2+} в ZnSe, см. верхнюю часть рис. 1. Однако на этот спектральный диапазон может накладываться излучение структурных дефектов CdTe, см., например, [31]; кроме

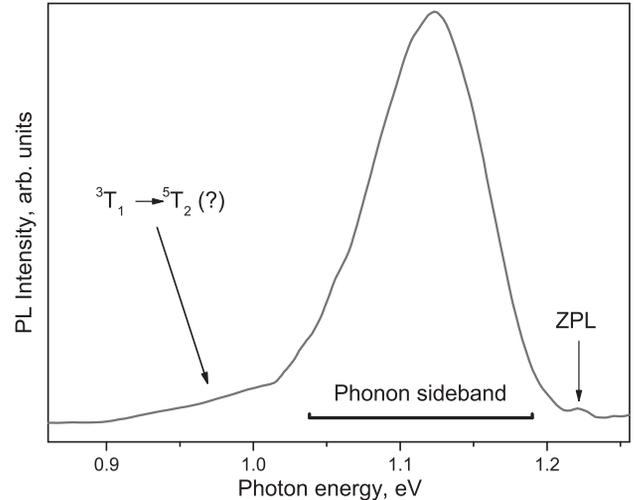


Рис. 4. Спектр фотолюминесценции CdTe:Fe, записанный в условиях импульсного возбуждения при температуре 7 К. Задержка относительно конца возбуждающего лазерного импульса составляет 1.4 мс. Бесфононный переход (ZPL) расположен в районе 1.22 эВ

того, возможен вклад в излучение ионов железа, находящихся в другом зарядовом состоянии.

В отличие от внутрицентровой люминесценции, обычное примесно-дефектное излучение в полупроводниках с прямым краем фундаментального поглощения характеризуется нано- или микросекундными временами затухания. Поэтому для отделения люминесцентного фона мы провели измерения ФЛ с временным разрешением. Пример спектра излучения, полученного при сравнительно больших временах задержки около 1.4 мс, показан на рис. 4. Видно, что в данном спектре регистрируется основная полоса с максимумом 1.1 эВ, длинноволновая особенность в районе 0.9 эВ и слабая коротковолновая компонента с максимумом 1.22 эВ. Исходя из сравнительно больших времен затухания, можно утверждать, что все перечисленные компоненты представляют собой внутрицентровую ФЛ.

Для оценки нефелоксетического эффекта, как и в случае ZnSe:Fe, наибольший интерес представляет спектральное положение бесфононного перехода (переходов). В случае спектра ФЛ на рис. 4 основным кандидатом на роль бесфононного перехода является, очевидно, узкая компонента в районе 1.22 эВ. Как и в случае ZnSe (рис. 3), данная линия может иметь тонкую структуру, которая не разрешается в наших экспериментах. Для подтверждения сделанной интерпретации нами была измерена кинетика люминесценции полосы 1.1. эВ и узкой компонен-

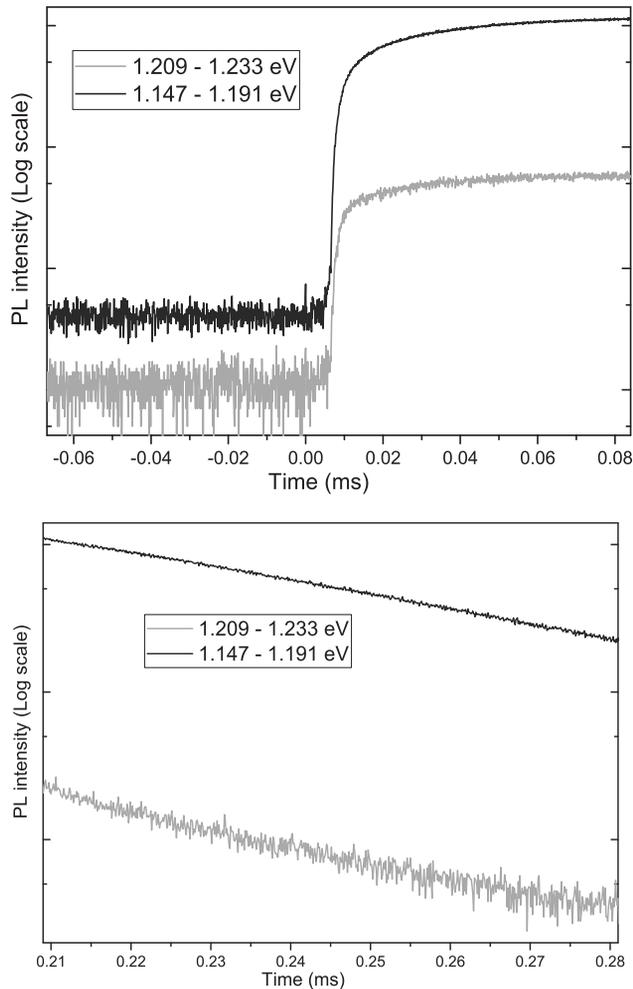


Рис. 5. Кинетики возгорания (верхняя панель) и затухания (нижняя панель) сигнала фотолюминесценции, записанные в двух различных спектральных областях при возбуждении кристалла CdTe:Fe импульсами прямоугольной формы. Первая область (серые кривые) соответствует бесфонному (ZPL) переходу на рис. 4, вторая область — фрагменту широкой полосы в районе 1.1 эВ. Температура 5 К, длина волны лазерного возбуждения 660 нм

ты в районе 1.22 эВ при температуре 7 К. Результаты измерений иллюстрирует рис. 5 (верхняя панель) (возгорание ФЛ) и рис. 5 (нижняя панель) (гашение ФЛ). Как видно на данных рисунках, наблюдается схожий характер возгорания и тушения сигнала, что подтверждает отношение узкой линии 1.22 эВ и широкой полосы 1.1 эВ к одной и той же люминесцентной системе. Таким образом, можно утверждать, что пик 1.22 эВ действительно является бесфонным переходом, а полоса 1.1 эВ возникает в результате взаимодействия с фонной подсистемой.

В кристаллах CdTe, исследованных в данной работе, присутствие оптически активных ионов железа Fe^{2+} подтверждается наличием интенсивной люминесценции, соответствующей переходу ${}^5\text{T}_2({}^5\text{D}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$, см. рис. 1. Тем не менее возможным альтернативным кандидатом на роль обсуждаемой люминесцентной системы в CdTe могли бы быть ионы Fe^{3+} . Как показывают оценки (см. Приложение), первое возбужденное состояние для иона Fe^{3+} расположено в районе 2 эВ. Это существенно выше, чем спектральное положение полос на рис. 4 (около 1.1–1.2 эВ). Кроме того, в описанных выше экспериментах мы использовали оптическое возбуждение с энергией кванта, превышающей край фундаментального поглощения CdTe. В этом случае возбуждающее излучение поглощается в тонком приповерхностном слое и прямое (внутрицентровое) возбуждение Fe^{3+} маловероятно ввиду малого значения сечения для соответствующего процесса. Наиболее эффективный механизм возбуждения состоит, по-видимому, в захвате фотовозбужденного электрона ионом Fe^{3+} и затем релаксации в одно из возбужденных состояний иона Fe^{2+} [21]. Ион Fe^{3+} в решетке CdTe формирует кулоновский потенциал, аналогичный водородоподобному донору в CdTe (свойства водородоподобных доноров в CdTe описаны, в частности, в работе [32]). Поэтому при гелиевых температурах следует ожидать эффективного захвата электронов с последующим формированием слабосвязанных (водородоподобных) состояний. В то же время ион Fe^{2+} не формирует дальнедействующего притягивающего потенциала для дырок, поэтому процесс, при котором происходит захват дырки ионом Fe^{2+} с последующим формированием иона Fe^{3+} в возбужденном состоянии, представляется маловероятным.

Таким образом, в условиях эксперимента при возбуждении выше края фундаментального поглощения следует ожидать внутрицентральной люминесценции именно ионов Fe^{2+} . В этом случае качественный анализ, основанный на диаграммах Танабэ–Сугано, позволяет однозначно отождествить бесфонную компоненту 1.22 эВ и полосу 1.1 эВ с переходом ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$. Таким образом, из представленных выше спектроскопических данных следует, что переход ${}^3\text{T}_1({}^3\text{H}) \rightarrow {}^5\text{E}({}^5\text{D})$ между внутренними оболочками иона Fe^{2+} в ZnSe и CdTe, формирует схожие по структуре спектры излучения, состоящие из бесфонного пика (пику) и широкой полосы, возникающей за счет взаимодействия с фонной подсистемой. При этом спектральное поло-

Таблица 1. Энергетические значения переходов, наблюдаемых в эксперименте для ZnSe:Fe и CdTe:Fe (значения приведены в см⁻¹)

	${}^5T_2({}^5D) \rightarrow {}^5E({}^5D)$	${}^3T_1({}^3H) \rightarrow {}^5T_2({}^5D)$	${}^3T_1({}^3H) \rightarrow {}^5E({}^5D)$
ZnSe:Fe	2700-2950	7140	11155
CdTe:Fe	2197	6250	8695

жение бесфоннного пика (или центр тяжести серии пиков) согласуется с качественным анализом в рамках диаграмм Танабэ–Сугано. Спектроскопические данные по бесфоннным переходам с участием состояний ${}^5T_2({}^5D)$, ${}^5E({}^5D)$, ${}^3T_1({}^3H)$, полученные в настоящей работе и взятые из работ [28,31], систематизированы в табл. 1

4. РОЛЬ НЕФЕЛОКСЕТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА Fe^{2+} В CdTe И ZnSe

Как следует из рис. 2 а и табл. 1, в отличие от качественных рассуждений, количественный анализ спектроскопических данных на основе диаграмм Танабэ–Сугано для свободных ионов Fe^{2+} наталкивается на определенные противоречия. Спектральное положение бесфоннных линий для перехода ${}^5T_2({}^5D) \rightarrow {}^5E({}^5D)$ соответствует $10Dq$ и, таким образом, характеризует величину кристаллического поля. Как видно из табл. 1, величина кристаллического поля в ZnSe на 20-25 % выше, чем в CdTe. Из диаграммы Танабэ–Сугано на рис. 2 а сразу следует, что в CdTe переход ${}^3T_1({}^3H) \rightarrow {}^5E({}^5D)$ должен смещаться в коротковолновую область по сравнению с ZnSe. В то же время из экспериментальных данных следует обратная тенденция — соответствующая линия демонстрирует выраженный длинноволновый сдвиг. Мы предполагаем, что данное расхождение иллюстрирует увеличение нефелоксетического эффекта при переходе от ZnSe к CdTe. Отметим, что если принять уменьшение энергии состояния ${}^3T_1({}^3H)$ по отношению к ${}^5E({}^5D)$ и ${}^5T_2({}^5D)$ за счет нефелоксетического эффекта, то наблюдаемая для CdTe полоса в районе 0.9 эВ попадает как раз в ту область, где должно регистрироваться излучение перехода ${}^3T_1({}^3H) \rightarrow {}^5T_2({}^5D)$.

Согласно теории кристаллического поля, вычисления значений расщепления энергетических уровней можно провести с параметром расщепления кристаллическим полем Dq (ligand field splitting) для материала матрицы и параметрами, определяющими межэлектронное взаимодействие [33]. При

расчете используются интегралы Слэтера F_i , которые из-за сложности проведения вычислений *ab initio* для ионов в кристаллической матрице, дающих результаты с точностью, приближающейся к спектроскопической, обычно остаются параметрами теории и определяются из эксперимента [33]. Рака ввел новые обозначения для интегралов Слэтера, которые удобно использовать как полуэмпирические параметры при решении задачи [33],

$$B = \frac{9F^2 - 5F^4}{441}, \quad (2)$$

$$C = \frac{5F^4}{63}. \quad (3)$$

Как уже отмечалось выше, параметр Dq определяет расстояние между нижними уровнями 5E и 5T_2 и поэтому однозначно определяется из экспериментальных данных. Параметры B и C для свободного иона Fe^{2+} приведены в справочниках: $B_0 = 917 \text{ см}^{-1}$, $C_0 = 4040 \text{ см}^{-1}$ [34]. При интерпретации экспериментальных данных феноменологический учет нефелоксетических эффектов может быть осуществлен за счет использования параметров Рака B и C , значения которых отличаются от таковых для свободных ионов. Фактически, это соответствует эффективному уменьшению межэлектронного отталкивания. Для иона в решетке данные параметры могут также быть вычислены *ab initio* и поэтому являются удобными при разработке и адаптации достаточно сложных современных теорий.

Полученные нами экспериментальные данные позволили уточнить значения параметров B и C для иона Fe^{2+} , внедренного в решетки ZnSe и CdTe. На рис. 6 приведен разброс допустимых значений параметров B и C для нашей задачи, которые дают энергетический сдвиг между ${}^5E({}^5D)$ и ${}^3T_1({}^3H)$ примерно 1.383 эВ в ZnSe (рис. 3) и примерно 1.078 эВ в CdTe. Как видно, диапазон подходящих пар значений в случае ZnSe: $C = 2550 - 2800 \text{ см}^{-1}$, $B = 590 - 783 \text{ см}^{-1}$. Данные значения были выбраны в соответствии с правилом (закономерностью) соотношения $C/B = 4 - 4.5$ [26]. Кроме то-

Таблица 2. Энергетические значения переходов, наблюдаемых в эксперименте для ZnSe:Fe и CdTe:Fe

	$B, \text{см}^{-1}$	$C, \text{см}^{-1}$	$Dq, \text{см}^{-1}$	$B_0, \text{см}^{-1}$	$C_0, \text{см}^{-1}$	β_1
ZnSe:Fe	600(±15)	2733(±18)	300 [28]	917 [34]	4040 [34]	0.941
CdTe:Fe	500(±15)	2242(±29)	228 [28]	917 [34]	4040 [34]	0.778

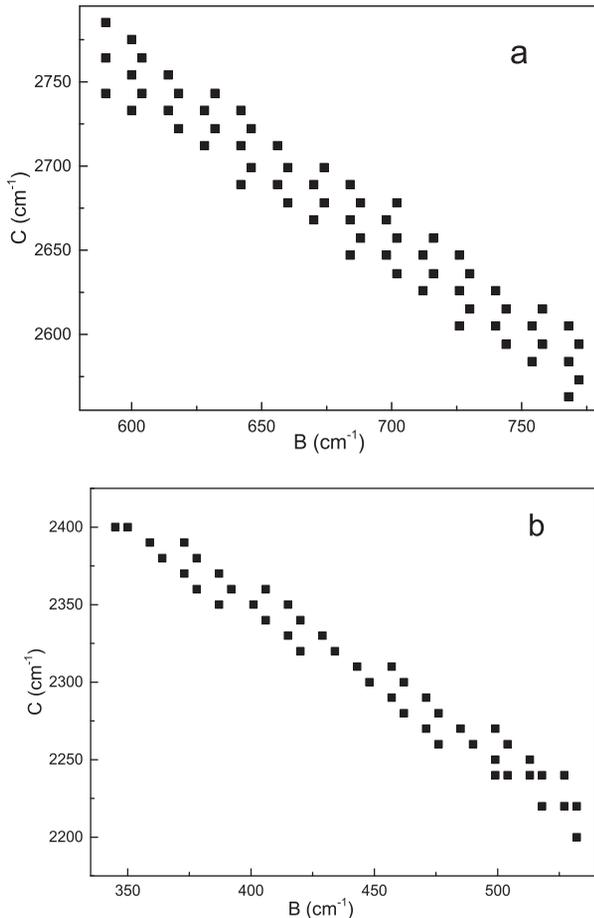


Рис. 6. Диапазон значений параметров B и C , при которых получается искомое значение 1.383 эВ для уровня 3T_1 ZnSe:Fe (a) и 1.078 эВ для уровня 3T_1 CdTe:Fe (b)

го, для ионов группы железа ожидается более существенное уменьшение параметра B , чем параметра C , по отношению к значениям для свободного иона. Следовательно, в качестве оптимальных параметров можно выбрать $B = 600 \text{ см}^{-1} (\pm 15)$ и $C = 2733 \text{ см}^{-1} (\pm 18)$. Величина расщепления кристаллическим полем $Dq = 228 \text{ см}^{-1}$ в CdTe несколько ниже, чем в ZnSe (см. табл. 1), за счет различия параметров решетки, определяющих величину кристаллического поля, таких, например, как доля

ионной связи. Диапазон подходящих пар значений для Fe^{2+} в CdTe также отличается от свободного иона: $C = 2220 - 2280 \text{ см}^{-1}$, $B = 476 - 518 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2 b). Мы выбрали средние подходящие значения параметров Рака B и C для иона Fe^{2+} в CdTe: $B = 500 (\pm 18) \text{ см}^{-1}$, $C = 2242 (\pm 29) \text{ см}^{-1}$.

Определенные значения параметров Рака (B, C) позволили далее рассчитать величину нефелоксетического эффекта, описывающего степень ослабления жесткости связей в ионе (переход от ионных связей к ковалентным). Весьма последовательно этот эффект (эффект расширяющегося облака), наиболее значимый для d -переходных элементов, рассматривал Йоргенсен [8]. Для этих ионов происходит увеличение размера d -орбиталей из-за их экранирования неподеленными электронными парами лигандов. Увеличение нефелоксетического эффекта приблизительно соответствует росту ковалентности связи лиганд–металл.

Как уже отмечалось во Введении, последнее время стали появляться несколько модифицированные подходы к оценке нефелоксетического эффекта β_1 [7]. Из соотношения (1) следует, что в ZnSe $\beta_1(\text{ZnSe}) = 0.941 (\pm 0.04)$. Аналогичный расчет для CdTe:Fe дает существенно меньшие значения, что означает некоторое ослабление ковалентной связи: $\beta_1(\text{CdTe}) = 0.778 (\pm 0.08)$. Все полученные параметры приведены в табл. 2.

Следует отметить, что увеличение роли нефелоксетического эффекта в случае матрицы CdTe является в принципе ожидаемым, так как более высокая величина Dq размещает ZnSe правее в спектроскопическом ряду лигандов [35], а нефелоксетический эффект, как правило, проявляется ярче для более слабых лигандов [12]. Вместе с тем, это соотношение является довольно грубым и часто нарушается (см., например, [36] и приведенные там ссылки), что является одним из проявлений нарушений теории кристаллического поля. Корректное описание нефелоксетического эффекта требует включения в рассмотрение целого ряда факторов, таких как влияние электронной оболочки конкретного иона на электронную оболочку лиганда, зависимость эф-

фекта от расстояния от центра до лиганда, а также роль эффектов динамической и статической корреляции электронного движения. Для решения данной задачи в последние годы активно развивается *ab initio* теория лигандного поля (*ab initio* ligand field theory, AILFT) [13], сочетающая методика теории лигандного поля [14] и высокоточные методы квантовой химии, позволяющие учесть многоэталонный (multi-reference) характер волновых функций электронов, участвующих в связи иона и лиганда, а также динамическую корреляцию движения электронов иона и лиганда. Насколько известно авторам, вследствие сложности изучаемых систем подобные расчеты для них на настоящий момент в литературе отсутствуют. Таким образом, полученные в работе результаты могут также служить для определения точности и дальнейшего развития современных теоретических подходов в области физики и химии ионов переходных металлов, внедренных в кристаллические матрицы.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, при гелиевых температурах зарегистрированы линии излучения, соответствующие переходам ${}^3T_1(5D) \rightarrow {}^5E(5D)$ и ${}^3T_1(5D) \rightarrow {}^5T_2(5D)$ иона Fe^{2+} в матрице CdTe. С учетом наличия исчерпывающих экспериментальных данных о тонкой структуре перехода ${}^5T_2(5D) \rightarrow {}^5E(5D)$ это позволило провести сравнительный анализ нефелоксетического эффекта при формировании электронного спектра ионов Fe^{2+} в матрицах CdTe и ZnSe. Данные матрицы имеют одинаковый тип решетки, но различаются значением постоянной решетки, величиной кристаллического поля и ролью многоэлектронных поправок.

Расчеты в рамках теории кристаллического поля, опирающиеся на полученные экспериментальные данные и недавние результаты работы [28], позволили уточнить полуэмпирические параметры Рака для ионов Fe^{2+} как в ZnSe — $B = 600 \text{ см}^{-1}$, $C = 2733 \text{ см}^{-1}$, так и в CdTe — $B = 500 \text{ см}^{-1}$, $C = 2242 \text{ см}^{-1}$, а также величину нефелоксетического эффекта $\beta_1 = 0.941$ для ионов Fe^{2+} в ZnSe и $\beta_1 = 0.778$ для Fe^{2+} в CdTe. Обнаруженное заметное возрастание нефелоксетического эффекта в CdTe мы связываем с тем, что в случае ZnSe связь носит более ионный характер, что выражается в большей величине Dq . Склонность кубической матрицы CdTe к образованию ковалентной связи указывает на то, что для ионов, помещенных в эту матрицу, можно ожидать более ярких спектральных эффек-

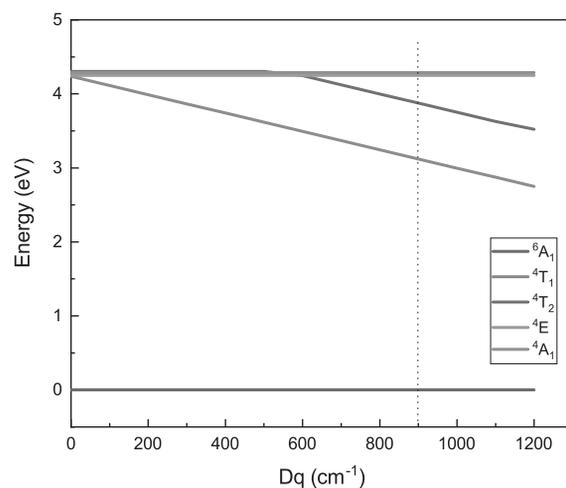


Рис. 7. Рассчитанная зависимость энергетических значений расщепления в тетраэдрическом кристаллическом поле от величины поля для ионов Fe^{3+} (d^5). Пунктирной линией показано приблизительное положение кристаллического поля для матрицы CdTe

тов, связанных с влиянием многоэлектронных корреляций. Полученные данные, помимо возможности прямого использования для количественного описания спектральных свойств изучаемых центров, могут служить для оценки точности разрабатываемых в настоящее время высокоточных методов описания электронных свойств ионов переходных металлов, внедренных в кристаллические матрицы.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 19-79-30086.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ДИАГРАММА ТАНАБЕ – СУГАНО ДЛЯ ИОНА Fe^{3+}

В расчетах мы использовали значения $B = 1015 \text{ см}^{-1}$ и $C = 4800 \text{ см}^{-1}$. Параметр расщепления кристаллическим полем для CdTe варьируется в диапазоне $800\text{--}900 \text{ см}^{-1}$. Результаты расчетов приведены на рис. 7. Как следует из диаграммы, возможные уровни 4T_1 и 4T_2 лежат значительно выше по энергии (${}^4T_1 \sim 3.1 \text{ эВ}$ и ${}^4T_2 \sim 4 \text{ эВ}$), чем полученные экспериментальные значения и чем результаты аналогичных расчетов для ионов Fe^{2+} , приведенных в основном тексте работы. Таким образом, мы исключаем возможность участия внутрицентровых излучательных переходов в Fe^{3+} в спектрах люминесценции исследованных образцов.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. E. Dormidonov, K. N. Firsov, E. M. Gavrishchuk et al., *Appl. Phys. B* **122**, 211 (2016).
2. Y. Wang, T. T. Fernandez, N. Coluccelli et al., *Opt. Express*, **25**, 25193 (2017).
3. S. Mirov, V. Fedorov, I. Moskalev et al., *J. Luminescence*, **133**, 268 (2013).
4. J. Cook, M. Chazot, A. Kostogiannes et al., *Opt. Mater. Express* **12**, 1555 (2022).
5. Y. Luo, M. Yin, L. Chen et al., *Opt. Mater. Express* **11**, 2744 (2021).
6. А. И. Белогорохов, М. И. Кулаков, В. А. Кремерман и др., *ЖЭТФ* **94**, 174 (1988) [A. I. Belogorokhov, M. I. Kulakov, V. A. Kremerman et al., *Sov. Phys. JETP* **67**, 1184 (1988)].
7. М. Н. Сарычев, И. В. Жевстовских, Ю. В. Коростелин, и др., *ЖЭТФ* **163**, 96 (2023).
8. А. М. Воротынов, А. И. Панкрац, М. И. Колков, *ЖЭТФ* **160**, 670 (2021).
9. S. B. Mirov, I. S. Moskalev, S. Vasilyev et al., *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **24**, 1 (2018).
10. J. Shee, M. Loipersberger, D. Hait et al., *J. Chem. Phys.* **154**, 194109 (2021).
11. K. Li, H. Lian, R. Van Deun et al., *Dyes and Pigments* **162**, 214 (2019).
12. Chr. K. Jurgensen, *Progress in Inorganic Chemistry* **4**, 73 (1962).
13. *Molecular Electronic Structures of Transition Metal Complexes II. Structure and Bonding*, ed. by D. Mingos, P. Day and J. Dahl, Springer, Berlin (2011).
14. B. N. Figgis and M. A. Hitchman, *Ligand field theory and its applications*, Wiley-VCH, New York (2000).
15. L. Lang, M. Atanasov and F. Neese, *J. Phys. Chem. A* **124**, 1025 (2020).
16. E.-L. Andreici Etimie, N. M. Avram, and M. G. Brik, *Opt. Mater. X* **16**, 100188 (2022).
17. A. Suchocki, S. W. Biernacki, A. Kaminska et al., *J. Lumin.* **102-103**, 571(2003).
18. K. P. O'Donnell, K. M. Lee, and G. D. Watkins, *J.Phys.C: Solid State Phys.* **16**, 723 (1983).
19. J. W. Evans, T. R. Harris, B. R. Reddy et al., *J. Lumin.* **188**, 541 (2017).
20. G. Roussos, H.-J. Schulz, M. Thiede, and J. Lumin. **31-32**, 409 (1984).
21. V. V. Fedorov, S. B. Mirov, A. Gallian et al., *IEEE J. Quant. Electr.* **42**, 907 (2006).
22. A. Salem, E. Saion, N. Al-Hada et al., *Appl. Sci.* **6**, 278 (2016).
23. E. E. Vogel, O. Mualin, M. A. de Orue et al., *Physical Review B* **50**, 5231 (1994).
24. S. B. Mirov, V. V. Fedorov, D. Martyshkin et al., *IEEE J. Selected Topics in Quan. Electron.* **21**, 1601719 (2015).
25. R. I. Avetisov, S. S. Balabanov, K. N. Firsov et al., *J. Crystal Growth* **491**, 36 (2018).
26. A. Gladilin, S. Chentsov, O. Uvarov et al., *J. Appl. Phys.* **126**, 015702 (2019).
27. M. P. Frolov, Yu. V. Korostelin, V. I. Kozlovsky, and Ya. K. Skasyrsky, *Opt. Lett.* **44**, 5453 (2019).
28. V. S. Krivobok, D. F. Aminev, E. E. Onishchenko et al., *JETP Lett.* **117**, 344 (2023).
29. J. Peppers, V. V. Fedorov, and S.B. Mirov, *Opt. Express* **23**, 4406 (2015).
30. R. Kernocker, K. Lischka, L. Palmetshofer et al., *J. Crystal Growth* **86**, 625 (1988).
31. D. F. Aminev, A. A. Pruchkina, V. S. Krivobok et al., *Opt. Mat. Express* **11**, 210 (2021).
32. В. С. Багаев, В. С. Кривобок, Е. Е. Онищенко и др., *ЖЭТФ* **140**, 929 (2011).
33. S. Sugano, Y. Tanabe, and H. Kamimura, *Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals*, Academic Press, New York (1970).
34. Y. Tanabe and S. Sugano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **9**, 753 (1954).
35. C. E. Housecroft, A. G. Sharpe, *Inorganic Chemistry (4th ed.)*, Prentice Hall, Hoboken (2012).
36. A. L. Tchougreff and R. Dronskowski, *International Journal of Quantum Chemistry* **109**, 2606 (2009).

СРАВНЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ЛИНЕЙНО И ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ГАУССОВЫХ ПОЛЯХ

А. В. Боровский^a, А. Л. Галкин^{b}*

^a *Байкальский государственный университет
664003, Иркутск, Россия*

^b *Институт общей физики имени А. М. Прохорова Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 декабря 2023 г.,
после переработки 23 января 2024 г.
Принята к публикации 23 января 2024 г.

Произведен сравнительный анализ излучения электрона в гауссовых полях линейной и круговой поляризации. Для короткого лазерного импульса определены локальные (мощность в телесный угол и полная мощность) и интегральные (излучаемая с траектории энергия) характеристики излучения электрона. Показано, что обнаруженный ранее закон роста пиковой угловой мощности в поле линейной поляризации распространяется и на случай поля круговой поляризации с уменьшением числового коэффициента в 2 раза вследствие уменьшения амплитуды поля в $\sqrt{2}$ раз. При обратном рассеянии в обоих рассматриваемых случаях линейной и круговой поляризации характеристики излучения имеют степенной рост с показателями 6 (пиковая мощность в телесный угол) и 4 (мощность, излучаемая энергия) по начальной энергии электрона и значительно превосходят значения характеристик излучения с симметричных траекторий. Получена оценка излучаемой угловой мощности в направлении скорости движения.

DOI: 10.31857/S0044451024060026

1. ВВЕДЕНИЕ

Заряженная частица испытывает максимальное воздействие со стороны электромагнитного поля в окрестности фокуса лазерного импульса. В результате спектр излучения электронов может достигать рентгеновского и гамма-диапазонов [1]. Исследование генерации излучения имеет прикладное и фундаментальное значения. Источники излучения с предсказанием пиковых значений интенсивности и распределения мощности излучения представляют интерес в биомедицине и атомной физике [2,3]. Постановки прикладных задач основываются на начальном положении «стационарного» электрона непосредственно в фокусе лазерного импульса, что приводит к излучению в виде классического томсоновского рассеяния с симметрией «вперед-назад». Излучение электрона, который вследствие взаимодействия с полем приобретает кинетическую энергию, трактуется как нелинейное томсоновского

рассеяние. В варианте встречного движения электрона по отношению к лазерному импульсу излучение электрона также укладывается в схему нелинейного томсоновского рассеяния.

С фундаментальной точки зрения представляет интерес получение максимальных характеристик излучения, а также установление особенностей излучения в связи с возможностью возникновения радиационно-доминантного режима [4, 5]. Заметный вклад радиационного трения отмечен в работах [6–8].

Различные аспекты нелинейного томсоновского рассеяния рассмотрены в работах [9–11]. Актуальна разработка методик расчета мощности излучения, альтернативных релятивистской формуле Лармора [12]. Так в работе [13] предложена методика построения диаграмм излучения электрона, позволяющая также определять интегральную по направлениям мощность излучения. Обнаружен степенной закон роста с показателем 6 угловой мощности обратного рассеяния в поле линейно поляризованного лазерного излучения по начальной кинетической энергии электрона [14].

* E-mail: galkin@kapella.gpi.ru

Целью данной работы является сравнительный анализ излучения электрона в лазерных полях линейной и круговой поляризации.

2. МОДЕЛИ СФОКУСИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ПОЛЯ

При выборе модели сфокусированного лазерного поля обычно руководствуются критерием точности соответствия уравнениям Максвелла. Вторым важным критерием является непротиворечивость теории эксперименту. Также следует учитывать сложность реализации модели. Оценим модели по этим критериям.

Модель поперечных полей с плоским фазовым фронтом и неоднородным поперечным распределением не удовлетворяет уравнениям Максвелла [15]. Использовалась, например, в работах [6–8]. В общем случае не описывает наблюдаемый в эксперименте аксиально-симметричный выброс электронов ионизации из области взаимодействия с лазерным полем линейной поляризации [16, 17]. Описывает выброс по направлению поляризации, что по существующим представлениям не важно для решаемых в работах [6–8] задач.

Модель гауссовых пучков с поперечно-продольными компонентами поля вследствие учета наклона фазового фронта является решением параболического уравнения — приближения волнового уравнения — прямого следствия уравнений Максвелла в вакууме, т.е. является приближенным решением уравнений Максвелла [18]. Существует много решений в виде полей Гаусса–Лагерра. Основная мода Гаусса–Лагерра имеет экспоненциально спадающую от оси поперечную неоднородность. Это распределение полей удовлетворяет критерию аксиальной симметрии выброса электрона из области взаимодействия. Условия применимости данного приближения следующие:

$$\varepsilon = \frac{1}{k\rho_0}, \quad \delta = \frac{1}{kL}, \quad \varepsilon^2 \ll 1, \quad \delta \ll 1.$$

Здесь ρ_0 — размер поперечной перетяжки лазерного импульса на полувысоте в фокальной плоскости, L — продольный размер лазерного импульса, k — волновое число лазерного излучения. Коэффициент ε^2 появляется в волновом уравнении для комплексной амплитуды векторного потенциала. Отметим, что оба условия получены при применении метода разделения переменных к волновому уравнению и менее обременительны, чем в других работах. Пер-

вое условие ограничивает снизу размер пятна фокусировки. Второе условие ограничивает применение огибающей поскольку $L = c\tau$, τ — длительность импульса, c — скорость света.

2.1. Модели полей на основе точного решения уравнений Максвелла

Уравнения Максвелла в вакууме сводятся к волновому уравнению для векторного потенциала, которое следует решать с граничными условиями на поверхности фокусирующей линзы. Решение линейного волнового уравнения с граничными условиями может быть получено методами разделения переменных, сведения к интегралу Кирхгофа, преобразованием Фурье–Лапласа. В работе [19] приводятся некоторые точные решения уравнений Максвелла, описывающие стационарные во времени сфокусированные лазерные импульсы. В частности, лазерный импульс электрического типа с поперечным электрическим полем и поперечно-продольным магнитным полем отличается от основной моды Гаусса–Лагерра. При стремлении к дифракционному пределу решение переходит в распределение полей типа гауссова пучка, представляющее собой сложную комбинацию мод Гаусса–Лагерра. Модель применялась [20] для интерпретации экспериментов с несимметричным ускорением электронов [21]. Отметим также построение резко сфокусированных полей с помощью обобщенного интеграла Кирхгофа [18].

Таким образом, если рассматривать лазерные поля с фокусировкой, не доходящей до дифракционного предела, то наиболее подходящими являются поля основной моды Гаусса–Лагерра — гауссова пучка. В данной статье $k\rho_0 = 26.7$, $kL = 10$. Поэтому приближение гауссова пучка является адекватным. В плане сложности реализации модели объем вычислений в данной работе на порядок превосходит объем работы [14]. Увеличение длительности импульса привело бы к нерациональному увеличению объема вычислений на удаленных от фокуса расстояниях.

Векторный потенциал лазерного поля гауссова пучка, распространяющегося вдоль оси z , в окрестности фокуса можно представить в виде

$$\mathbf{A} = A_0 \cos \sigma \exp \left(-\frac{1}{2} \rho^2 \cos^2 \sigma \right) \times \left(\mathbf{e}_x \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} \cos \varphi_{ph} + \mathbf{e}_y \sqrt{\frac{1-\alpha}{2}} \sin \varphi_{ph} \right), \quad (1)$$

где A_0 и φ_{ph} — амплитуда и фаза,

$$\varphi_{ph} = \omega t - kz + \sigma - \frac{1}{4}\rho^2 \sin 2\sigma,$$

$$\cos^2 \sigma = \frac{1}{1 + (z/z_R)^2}, \quad (2)$$

$$z_R = k\rho_0^2, \quad \rho = r/\rho_0,$$

r — поперечная координата, \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y — единичные векторы. Линейной поляризации вдоль x и y отвечают значения $\alpha = 1$ и $\alpha = -1$, циркулярной — $\alpha = 0$, при остальных значениях в интервале $(-1, 1)$ поляризация эллиптическая. При этом пиковая интенсивность (усредненный по периоду колебаний модуль вектора Пойнтинга) одинакова и определяется через релятивистскую интенсивность

$$I_0 = \frac{c}{8\pi}(A_0 k)^2 = \mu I_R,$$

$$I_R = \frac{m^2 c^5 \pi}{2e^2 \lambda^2},$$

где m и e — масса покоя и заряд электрона. Если задается μ , то определяется A_0 . Поля в общем случае эллиптической поляризации определяются компонентами $(E_x, E_y, \delta E_z, H_x, H_y, \delta H_z)$, продольные компоненты $\delta E_z, \delta H_z \approx \varepsilon = 1/k\rho_0$, (в работе [22] рассматриваются выражения для полей с более высокими порядками ε , но преимущество такого разложения не обсуждается). Как следует из выражения (1), амплитуда основного (поперечного) поля в случае циркулярной поляризации ($\alpha = 0$) в $\sqrt{2}$ раз меньше амплитуды поля линейной поляризации ($\alpha = \pm 1$), а максимальная амплитуда эллиптической поляризации имеет промежуточное значение, так что для числовых множителей этих амплитуд выполняются неравенства

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \leq \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{|\alpha|}{2}} \leq 1.$$

При переходе от гауссова пучка к импульсу также с гауссовым распределением по времени в описании полей следует учесть временную огибающую в виде множителя

$$\exp\left(-\left(\frac{t - (z - z_d)/c}{2\tau}\right)^2\right),$$

где τ — длительность импульса на полувысоте интенсивности, z_d — начальное расстояние от максимума временной огибающей до фокальной плоскости.

3. ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ГАУССОВЫХ ПОЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Решения уравнения Лоренца с начальными условиями и полным набором компонент поля $(E_x, E_y, \delta E_z, H_x, H_y, \delta H_z)$,

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{\frac{d\mathbf{r}}{dt}}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \right) = -e\mathbf{E} - \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{H}, \quad (3)$$

$$\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_0,$$

позволяют определить траекторию движения электрона, а также мгновенные значения компонент скорости \mathbf{v} и ускорения \mathbf{v}' .

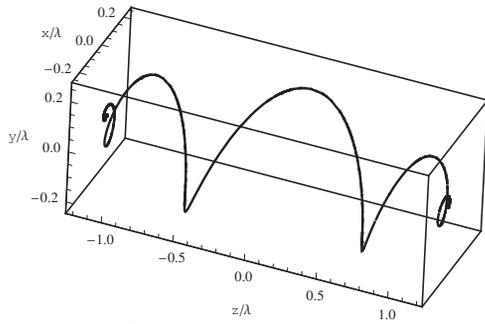
Стандартная задача (3) трех нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка численно решается в рамках пакета Wolfram Mathematica, но требует декомпозиции релятивистской нелинейности (нужно покомпонентно раскрыть все производные и привести к нормальному виду с выделением старших производных, по этой причине такова запись (3)). Тестирование проводится путем построения симметричных траекторий: электрон первоначально покоится на оси импульса перед фокусом и после взаимодействия с импульсом останавливается на таком же расстоянии за фокусом. Подбор начальных условий обеспечивает компенсацию динамического удара при включении поля. Расчет движения первоначально покоящегося электрона, сдвинутого с оси, в поле гауссова импульса основной моды приводит к симметричному выбросу из области взаимодействия.

Рассматривается короткий импульс $\tau c/\lambda = 1.5$, соответствующий длительности 3.5 фс. На рис. 1 представлены симметричные траектории движения электрона в полях с параметрами $\rho_0 = 26.7$, $\tau c/\lambda = 1.5$, $\mu = 5$ (размер перетяжки, длина временной огибающей в периодах осцилляций и пиковая интенсивность μ по отношению к релятивистской) различной поляризации $\alpha = 0(a), 1(b), -1(c)$. Начальные данные для задачи (3):

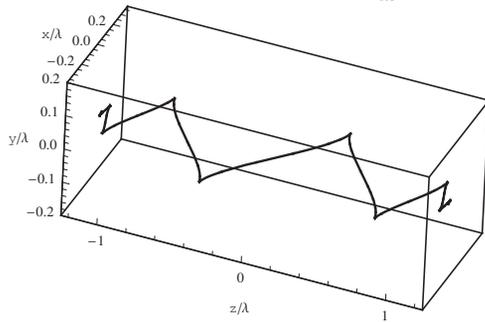
$$x_0/\lambda = 0, \quad y_0/\lambda = 0, \quad z_0/\lambda = -1.2,$$

$$v_{0x}/c = 10^{-18}, \quad v_{0y}/c = 5 \cdot 10^{-10}, \quad v_{0z}/c = 10^{-18}.$$

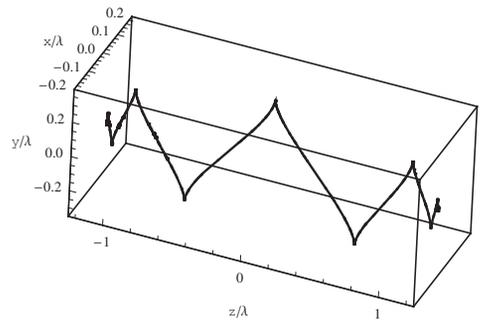
Траектории $\alpha = 1$ (рис. 1 b), $\alpha = -1$ (рис. 1 c) совмещаются при повороте вокруг оси z на угол $\pi/2$, так как воздействующие поля (1) сдвинуты по фазе.



a



b



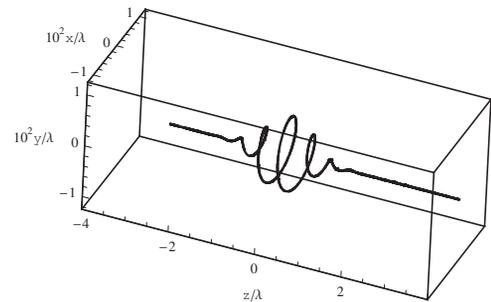
c

Рис. 1. Симметричные траектории электрона при $\mu = 5$, $\tau c/\lambda = 1.5$, $\alpha = 0$ (a), 1 (b), -1 (c)

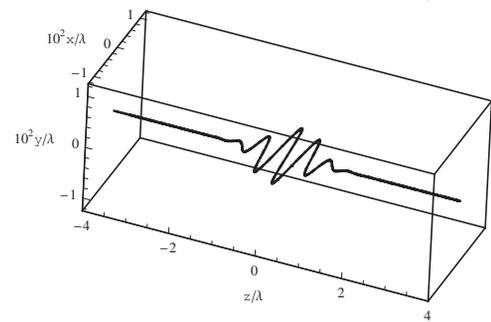
Для электрона, движущегося навстречу лазерному импульсу, начальная скорость связана с начальной кинетической энергией

$$\frac{W_{k_0}}{mc^2} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v_{0z}/c)^2}} - 1 = p.$$

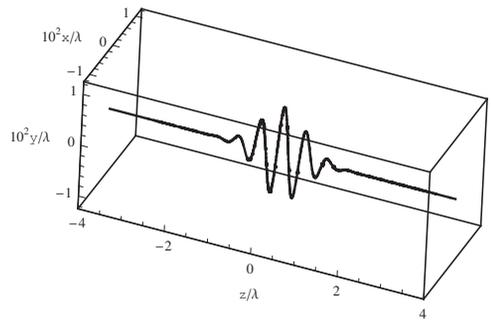
Поскольку симметричные траектории кроме тестового значения описывают максимальную энергию излучения по сравнению со всеми траекториями движения первоначально покоящегося электрона (не только на оси) при фиксированных параметрах лазерного импульса, далее будем полагать, что движение по симметричным траекториям соответствует случаю $p = 0$. Для $p > 0$ считаем, что электрон проходит около фокуса в момент максимума временной огибающей. Это соответствует изменению начальных условий $z_0 = v_{0z}(p)z_d/c$, $v_{0z} = v_{0z}(p)$ — модуль встречной



a



b



c

Рис. 2. Траектории движения электрона с начальной кинетической энергией $p = 20$ навстречу лазерному импульсу с параметрами $k\rho_0 = 26.7$, $\tau c/\lambda = 1.5$, $\mu = 5$ различной поляризации $\alpha = 0$ (a), 1 (b), -1 (c)

скорости, определяемый по p . На рис. 2 представлены траектории движения электрона в полях с параметрами $k\rho_0 = 26.7$, $\tau c/\lambda = 1.5$, $\mu = 5$ различной поляризации $\alpha = 0, 1, -1$ и с начальной кинетической энергией $p = 20$ (электрон движется в направлении уменьшения координаты z). Поскольку $z_d = 6\lambda$, а $v_{0z}(20)/c = 0.998866$, начальные условия $z_0/\lambda = 6$, $v_{0z}/c = -0.998866$, остальные — как для симметричных траекторий.

4. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ГАУССОВЫХ ПОЛЯХ

Движение электрона происходит под действием силы Лоренца, при этом электрон излучает электромагнитные импульсы. В модели излучения, основан-

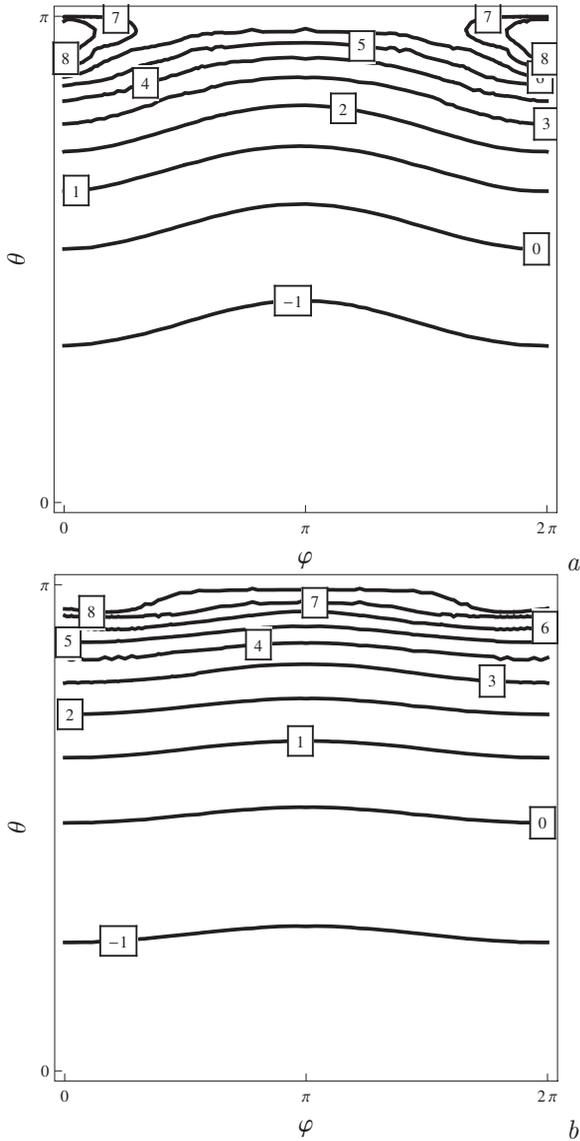


Рис. 3. Линии уровня $\lg [I_1^{-1} dI/d\Omega(\varphi, \theta)]$ излучения электрона с начальной кинетической энергией $p = 10$ навстречу лазерному импульсу с параметрами $k\rho_0 = 26.7$, $\tau c/\lambda = 1.5$, $\mu = 5$ различной поляризации $\alpha = 0(a)$, $1(b)$

ной на потенциалах Лиенара – Вихерта, электрон излучает поле

$$\mathbf{E}_{rad} = e \frac{1 - v^2/c^2}{(R - \mathbf{R} \cdot \mathbf{v}/c)^3} \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{v}}{c} R \right) + \frac{e}{c^2 (R - \mathbf{R} \cdot \mathbf{v}/c)^3} \left[\mathbf{R} \times \left[\left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{v}}{c} R \right) \times \mathbf{v}' \right] \right], \quad (4)$$

$$t_r + \frac{R(t_r)}{c} = t.$$

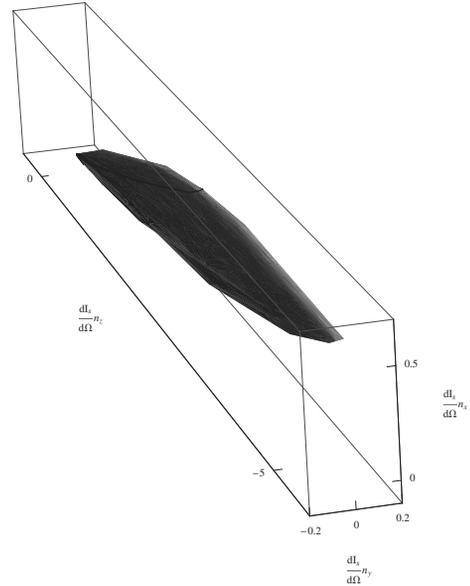


Рис. 4. Диаграмма направленности излучения электрона, построенная по распределению рис. 3 а ($p = 10$, $\alpha = 0$)

Для $\mathbf{R} = R\mathbf{n}$, $R \sim 10^4 \lambda$ имеем

$$\mathbf{E}_{rad} = e \frac{1 - v^2/c^2}{R^2 (1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}/c)^3} \left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) + \frac{e}{c^2 R (1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}/c)^3} \left[\mathbf{n} \times \left[\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \times \mathbf{v}' \right] \right]. \quad (5)$$

Распределение мощности излучения по телесному углу Ω в направлении \mathbf{n} (далее для краткости интенсивности),

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta),$$

фокус имеет координаты $(0, 0, 0)$, θ – азимутальный угол из фокуса по отношению к оси z , φ – полярный угол в фокальной плоскости xy , определяется вторым (излучательным) слагаемым в (4):

$$\frac{dI}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi} \frac{e^2}{c^3 (1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}/c)^6} \left| \mathbf{n} \times \left[\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \times \mathbf{v}' \right] \right|^2. \quad (6)$$

Для построения диаграммы направленности излучения в модели Лиенара – Вихерта необходимо вычислить распределение $dI/d\Omega(\varphi, \theta)$ и построить поверхность $\mathbf{n} dI/d\Omega$. Интегрирование выражения (6) по телесному углу дает мощность, излучаемую электроном в данный момент времени. Нормировка диаграмм излучения $\mathbf{n} dI/d\Omega$ в модели Лиенара – Вихерта производится величиной

$$I_1 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\lambda} \frac{1}{\lambda/c}.$$

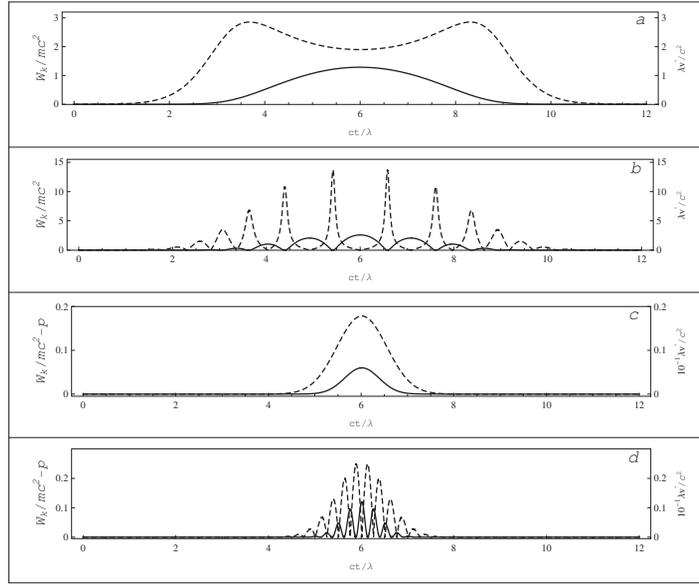


Рис. 5. Временной ход кинетической энергии W_k/mc^2 (сплошная кривая) и модуля ускорения $|v'|/c^2$ (штриховая кривая) электрона при движении по траекториям: $\alpha = 0, p = 0$ (a); $\alpha = 1, p = 0$ (b); $\alpha = 0, p = 10$ (c); $\alpha = 1, p = 10$ (d)

Определение максимального значения излучаемой мощности в телесный угол, $dI/d\Omega$, состоит в проведении оптимизационных расчетов. Разработана методика [23]; задача является нестандартной; программа реализована на фор-тране. На рис.3 представлены линии уровня распределений $\lg [I_1^{-1}dI/d\Omega(\varphi, \theta)]$ максимально по времени излучения встречного электрона ($p = 10$) в поле лазерного импульса с параметрами $k\rho_0 = 26.7, \tau c/\lambda = 1.5, \mu = 5$ для круговой ($\alpha = 0$) и линейной ($\alpha = 1$) поляризадий. Как следует из рис.3, в случае линейно поляризованного поля обратное рассеяние происходит в узкий конус в окрестности $\theta = \pi$ и хорошо описывается выражением [14]

$$\frac{1}{I_1} \frac{dI}{d\Omega} \Big|_{\theta=\pi} \cong \cong 6\pi\mu(p+1)^6 \left[1 + \sqrt{1 - \frac{1}{(p+1)^2}} \right]^4. \quad (7)$$

В случае циркулярной поляризации телесный угол излучения имеет наклон вследствие движения электрона по окружности в фокальной плоскости и сосредоточен в окрестности $\theta = 0.95\pi$. Диаграмма направленности излучения электрона для этого случая $10^{-8}/I_1 (ndI/d\Omega)$ представлена на рис. 4. Максимальная угловая мощность — максимальный продольный размер диаграммы; основное излучение идет в конус; конус наклонен.

Для оценки максимальной интенсивности излучения без проведения оптимизации предлагается следующий подход. Знаменатели выражения (4) максимальны при $\mathbf{n} \parallel \mathbf{v}$, т.е. можно положить $\mathbf{n} = \mathbf{v}/v$, тогда

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{n} \times \left[\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \times \mathbf{v}' \right] \right] &= \\ &= \left(\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}') - \mathbf{v}' \left(1 - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}}{c} \right) \right) \cong \\ &\cong \left(\left(\frac{\mathbf{v}}{v} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \left(\frac{\mathbf{v}}{v} \cdot \mathbf{v}' \right) - \mathbf{v}' \left(1 - \frac{v}{c} \right) \right) = \\ &= \left(1 - \frac{v}{c} \right) \left(\frac{\mathbf{v}}{v^2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}') - \mathbf{v}' \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{n} \times \left[\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \times \mathbf{v}' \right] \right]^2 &\cong \\ &\cong \left(1 - \frac{v}{c} \right)^2 \left(\frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}')^2}{v^2} + (\mathbf{v}')^2 - 2 \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}')^2}{v^2} \right) = \\ &= \left(1 - \frac{v}{c} \right)^2 \left((\mathbf{v}')^2 - \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}')^2}{v^2} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max \left[\frac{dI}{d\Omega} \right] &= \frac{c\mathbf{E}_{rad}^2}{4\pi} R_0^2 = \\ &= \frac{c}{4\pi} R_0^2 \frac{e^2}{c^4 R_0^2 (1-v/c)^6} \left(1 - \frac{v}{c} \right)^2 (\mathbf{v}')^2 \sin^2(\widehat{\mathbf{v}', \mathbf{v}}) = \\ &= \frac{e^2 (\mathbf{v}')^2 \sin^2(\widehat{\mathbf{v}', \mathbf{v}})}{4\pi c^3 (1-v/c)^4}. \quad (8) \end{aligned}$$

Для характеристики скорости движения воспользуемся кинетической энергией W_k/mc^2 . Временной ход кинетической энергии и модуля ускорения во времени показан на рис. 5.

5. РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ГАУССОВЫХ ПОЛЯХ

Представляет интерес изучение следующих характеристик.

1. Максимальная мощность в телесный угол, $\max[dI/d\Omega]$ с нормировкой на I_1 .

2. Мощность излучения

$$I = \int \frac{dI}{d\Omega} d\Omega$$

также с нормировкой на I_1 .

3. Излучаемая энергия с траектории движения

$$E = \int I dt$$

с нормировкой на

$$E_1 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\lambda},$$

где для $\lambda = 800$ нм

$$E_1 \frac{1}{mc^2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\lambda} \frac{1}{mc^2} \approx 2.35 \cdot 10^{-9}.$$

На рис. 6 а представлен временной ход мощности излучения электрона при движении вдоль симметричных траекторий рис. 1 для $\alpha = 0, 1, -1$. Всплески излучения при линейной поляризации иногда превосходят значения мощности излучения при циркулярной поляризации, что связано с более высокими значениями ускорения. Энергия, излучаемая с траекторий (интеграл от мощности по времени) при $p = 0$, равна $E/E_1 = 1.83 \cdot 10^3$ ($\alpha = 0$); $1.01 \cdot 10^3$ ($\alpha = 1$); $1.02 \cdot 10^3$ ($\alpha = -1$).

На рис. 6 б представлен временной ход мощности излучения электрона с начальной кинетической энергией $p = 20$ при движении вдоль траекторий рис. 2 для $\alpha = 0, 1, -1$. Энергия, излучаемая с траекторий, при $p = 20$ возрастает на порядки и выравнивается по поляризации: $E/E_1 = 1.03 \cdot 10^8$ ($\alpha = 0$); $1.08 \cdot 10^8$ ($\alpha = 1$); $1.10 \cdot 10^8$ ($\alpha = -1$).

Сводная информация по зависимости характеристик излучения от начальной кинетической энергии

p представлена на рис. 7. Расчетные значения изображены в виде точек черного ($\alpha = 0$), синего ($\alpha = 1$) и красного ($\alpha = -1$) цветов. Верхняя кривая 1 (в логарифмическом масштабе это прямая) есть зависимость (7); на этой кривой в соответствии с работой [14] располагаются значения максимальной угловой мощности излучения в поле линейной поляризации, $\alpha = \pm 1$. Кривая 2 есть зависимость типа (7) с вдвое меньшим коэффициентом; на этой кривой располагаются значения максимальной угловой мощности излучения в поле круговой поляризации, $\alpha = 0$. На аппроксимационной кривой 3

$$\frac{I_{max}}{I_1} \cong 64\pi\mu(p+1)^4$$

располагаются значения максимальной мощности излучения в поле линейной поляризации, $\alpha = \pm 1$. На аппроксимационной кривой 4

$$\frac{I_{max}}{I_1} \cong 32\pi\mu(p+1)^4$$

располагаются значения максимальной мощности излучения в поле круговой поляризации, $\alpha = 0$.

Зависимости энергии E/E_1 , излучаемой с траекторий как при линейной, так и при круговой поляризации, $\alpha = 0, \pm 1$, в рассматриваемом логарифмическом масштабе и при используемом обезразмеривании с большой точностью совпадают с зависимостью I_{max}/I_1 для $\alpha = 0$ и располагаются на аппроксимирующей кривой 4.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В соответствии с оценкой (8) максимум интенсивности может достигаться при максимуме модулей скорости и ускорения, при этом $\sin^2(\widehat{\mathbf{v}'}, \mathbf{v}) \approx 1$. Совпадение по времени максимумов имеет место для $\alpha = 0, p > 0$ (рис. 4 с), в этом случае приближение (8) хорошо работает. В случае $\alpha = \pm 1, p = 0$ (рис. 4 б) имеет место разделение по времени максимумов модулей скорости и ускорения [14]. В случае $\alpha = \pm 1, p > 0$ (рис. 4 д) обратное рассеяние происходит в направлении, противоположном оси z ($\theta = \pi$), в момент времени, когда достигается максимум модуля v'_y и $v_z = v_{0z}$; в этих предположениях получена оценка (7) [14]. Совпадение расчетов для циркулярной поляризации $\alpha = 0, p > 0$ с аппроксимирующей кривой (с уменьшенным в 2 раза коэффициентом вследствие уменьшения амплитуды поля в $\sqrt{2}$ раз) расширяет границы применимости аналитики. При

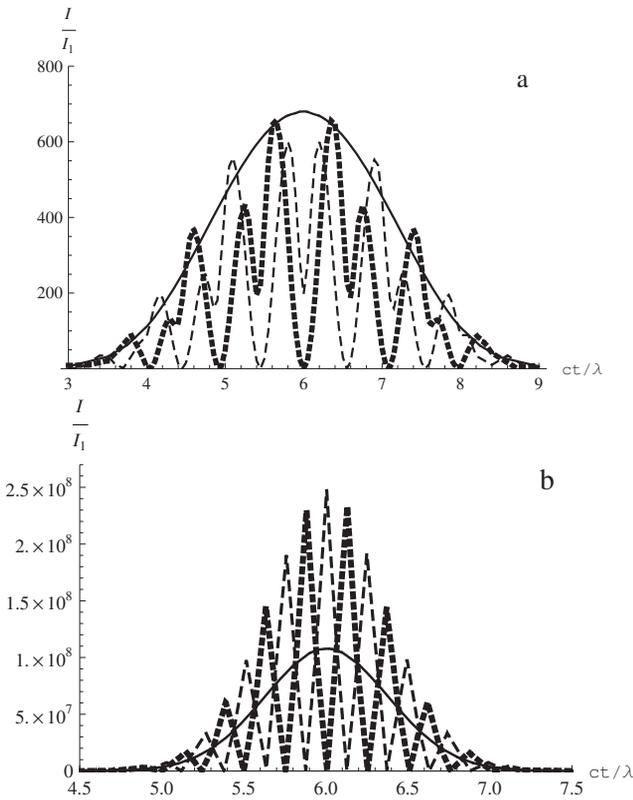


Рис. 6. Временной ход мощности излучения электрона при движении: *a* — вдоль симметричных траекторий рис. 1; *b* — с начальной кинетической энергией $p = 20$ вдоль траекторий рис. 2; $\alpha = 0$ (сплошные кривые), $\alpha = 1$ (штриховые кривые), $\alpha = -1$ (пунктирные кривые)

этом направление излучения максимальной интенсивности имеет наклон вследствие движения электрона по окружности в фокальной плоскости (см. рис. 3 *a* и рис. 4). Также в два раза различаются зависимости максимумов мощности излучения при линейной и круговой поляризации (зависимости 3, 4 на рис. 7).

В целом процесс рассеяния откликается на мгновенные значения интенсивности поля (модуля вектора Пойнтинга) без усреднения по периоду волны, поэтому обобщение выражения (7) для поля эллиптической поляризации состоит в добавлении множителя $1/2 + |\alpha|/2$. Таким образом, для поля эллиптической поляризации следует ожидать промежуточное положение между зависимостями 1, 2 для максимальной мощности в телесный угол и 3, 4 для максимальной мощности излучения с изменением относительно характеристик при линейной поляризации в $1/2 + |\alpha|/2$ раз.

В поле линейной поляризации, $\alpha = \pm 1$, $p = 0$, излучение с резкой кусочно-линейной симметричной

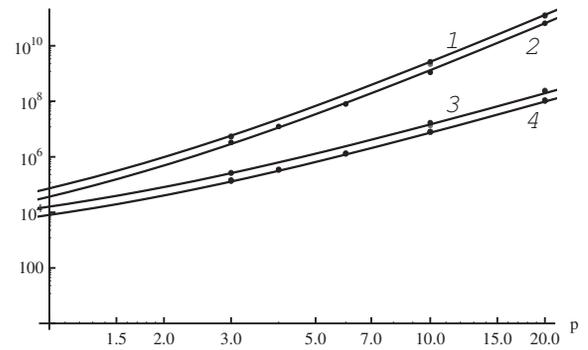


Рис. 7. Зависимости характеристик излучения от начальной кинетической энергией p : максимальная угловая мощность излучения в поле линейной поляризации $\alpha = \pm 1$ (кривая 1); максимальная угловая мощность излучения в поле круговой поляризации $\alpha = 0$ (кривая 2); мощность излучения в поле линейной поляризации $\alpha = \pm 1$ (кривая 3); мощность излучения в поле круговой поляризации $\alpha = 0$ и энергия, излучаемая с траекторий при линейной и круговой поляризациях $\alpha = 0, \pm 1$ (кривая 4)

траектории (рис. 1 *b, c*) трансформируется в сглаженный временной профиль мощности излучения (рис. 3 *a*) и, наоборот, излучение со сглаженного траектории $\alpha = \pm 1$, $p > 0$ при больших значениях p (рис. 2 *b, c*) трансформируется в резкий временной профиль мощности излучения (рис. 3 *b*). На симметричных траекториях при $\alpha = 0$, $p = 0$ продольная и поперечная компоненты скорости сопоставимы, и в момент достижения максимума модуля скорости приводят к более высоким значениям мощности излучения и излучаемой с траектории энергии по сравнению со случаем $\alpha = 1$, $p = 0$, где имеет место разделение по времени максимумов модулей скорости и ускорения. При больших значениях различие в амплитудах поля для $\alpha = \pm 1$, $p > 0$ и $\alpha = 0$, $p > 0$ приводит к двукратному различию значений максимальной мощности. В силу квазилинейного изменения мощности излучения для $\alpha = \pm 1$, $p > 0$ на периоде волны энергия излучения с траекторий совпадает с излучаемой энергией в поле круговой поляризации, $\alpha = 0$, $p > 0$, а нормировка на E_1 приводит к совпадению зависимостей 4 на рис. 7. Это совпадение случайно, поскольку только излучаемая с траектории энергия растет с ростом длительности лазерного импульса. Энергия, излучаемая с траектории, степенным образом, как $(p + 1)^4$, растет с ростом начальной кинетической энергии электрона, достигает значений 0.132 МэВ для $\lambda = 800$ нм в рассматриваемом диапазоне p и для данной длительности импульса. Значительно

более высокие значения излучаемой энергии с симметричной траектории ($p = 0$) в поле круговой поляризации по сравнению с излучением в поле линейной поляризации и выравнивание излучаемой энергии по поляризации при $p = 20$ можно объяснить уменьшением радиуса орбиты электрона с ростом p . Вопрос изучения зависимости радиуса орбиты электрона в фокальной плоскости от параметров гауссова импульса циркулярной поляризации и от энергии электрона интересен для отдельного рассмотрения.

7. ВЫВОДЫ

Проведен сравнительный анализ излучения электрона в гауссовых полях линейной и круговой поляризации. Получена оценка излучаемой мощности в телесный угол в направлении скорости движения. Определены локальные (мощность в телесный угол и мощность) и интегральные (излучаемая с траектории энергия) характеристики излучения. При обратном рассеянии в циркулярно поляризованном поле направление излучения максимальной интенсивности имеет наклон вследствие движения электрона по окружности в фокальной плоскости, но из-за малого радиуса это не приводит к отличию энергии, излучаемой с траектории, от энергии в случае линейно поляризованного поля, как для симметричных траекторий. Показано, что обнаруженный в работе [14] закон роста пиковой интенсивности в поле линейной поляризации распространяется и на случай поля круговой поляризации. При этом числовой коэффициент уменьшается в 2 раза вследствие уменьшения амплитуды поля в $\sqrt{2}$ раз. При обратном рассеянии в обоих рассматриваемых случаях линейной и круговой поляризации мощность излучения и излучаемая энергия растут как $(p + 1)^4$ по начальной энергии электрона и значительно превосходят значения характеристик излучения с симметричных траекторий.

Благодарности. Авторы благодарят М. В. Федорова за указание на возможность интерпретации результатов к эллиптической поляризации.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. L. Galkin, V. V. Korobkin, M. Yu. Romanovsky et al., Proc. SPIE **799319-1** (2011), doi:10.1117/12.880751.
2. A. Baltuka, Th. Udem, M. Uiberacker et al., Nature **421**, 611 (2003).
3. K. Lee, Y. H. Cha, M. S. Shin et al., Phys. Rev. E **6**, 026502 (2003).
4. S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, J. Koga et al., Plasma Phys. Rep. **30**, 196 (2004).
5. А. В. Башинов, А. А. Гоносков, А. В. Ким и др., КЭ **43**, 291 (2013).
6. A. Di Piazza, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Phys. Rev. Lett. **102**, 254802 (2009).
7. А. Л. Галкин, ЖЭТФ **142**, 230 (2012).
8. C. N. Harvey, Phys. Rev. Accel. Beams **21**, 114001 (2018).
9. Ju Gao, Phys. Rev. Lett. **93**, 243001 (2004).
10. П. А. Головинский, Е. А. Михин, ЖЭТФ **140**, 627 (2011).
11. Yifan Chang, Zishuai Cai, Yuting Shen et al., Laser Phys. **32**, 035302 (2022).
12. В. В. Лидский, Краткие сообщения по физике ФИАН **36**, 31 (2009).
13. A. V. Borovskiy and A. L. Galkin, Laser Phys. **32**, 084008 (2022).
14. A. V. Borovskiy and A. L. Galkin, Laser Phys. Lett. **20**, 036002 (2023).
15. B. Quesnel and P. Mora, Phys. Rev. E **58**, 3719 (1998).
16. S. Banerjee, S. Sepke, R. Shah et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 035004 (2005).
17. A. V. Borovskiy, A. L. Galkin, and M. P. Kalashnikov, Phys. Plasmas **22**, 043107 (2015).
18. А. В. Боровский, А. Л. Галкин, *Избранные задачи лазерной физики. Вакуумное ускорение электронов. Фокусировка параболическим зеркалом. Дифракция на клине, как проблема субволновой физики*, Palmarium Acad. Publ., Saarbrucken, Deutschland (2016).
19. В. С. Попов, В. Д. Мур, Н. Б. Нарожный и др., ЖЭТФ **149**, 623 (2016).
20. N. B. Narozhny and M. S. Fofanov, Phys. Lett. A **295**, 87 (2002).
21. G. Malka, E. Lefebvre, and J. L. Miquel, Phys. Rev. Lett. **78**, 3314 (1997).
22. Qingyu Yang, Yubo Wang, Yifei Cao et al., Laser Phys. Lett. **20**, 045301(2023).
23. А. В. Боровский, А. Л. Галкин, System Analysis and Mathematical Modeling **6** (2) (2024).

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ С ГИБКИМИ АВТОЭЛЕКТРОННЫМИ ЭМИТТЕРАМИ

В. И. Клец, А. Н. Образцов*

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

Поступила в редакцию 18 января 2024 г.,
после переработки 18 января 2024 г.
Принята к публикации 6 февраля 2024 г.

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследования эффекта возникновения электромеханических автоколебаний в системах, представляющих собой вакуумный диод с гибким автоэмиссионным катодом, в зависимости от его упругих свойств и способности к деформации. Экспериментально продемонстрирована возможность реализации автоколебательного режима для автоэлектронных эмиттеров на основе углеродных нанотрубок и алмазных микроигл. Разработана математическая модель электромеханических процессов, происходящих в рассматриваемых автоколебательных системах. На основе анализа совокупности полученных экспериментальных данных и моделирования показано, что эффект возбуждения автоколебаний в системе с гибким автоэмиссионным катодом определяется сочетанием параметров системы, обеспечивающих отрицательное значение эффективного коэффициента затухания. Рассмотрены потенциальные возможности практического использования автоколебаний автоэмиссионных катодов в различных микро- и наноэлектромеханических системах.

DOI: 10.31857/S0044451024060038

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние два десятилетия было получено достаточно большое число экспериментальных свидетельств явления, заключающегося в возникновении устойчивых незатухающих механических колебаний автоэмиссионных катодов, обладающих определенной механической гибкостью и упругостью, в процессе эмиссии электронов при постоянном приложенном напряжении [1–9]. Данное явление первоначально наблюдалось при изучении автоэлектронной эмиссии из отдельных углеродных нанотрубок (УНТ) и их пучков в камере электронного микроскопа (см., например, [1, 2]). Однако в этих первых исследованиях механизм возникновения таких колебаний не был установлен. Позднее механические колебания, возникающие в процессе эмиссии электронов, были подробно исследованы для нанопроволок из карбида кремния [3, 4], отдельных многостенных УНТ [5], микроразмерных жгутов, сплетенных из УНТ [6], а также автоэмиссионных ка-

тодов макроскопических размеров, изготовленных из тонких УНТ-мембран [7, 8]. В этих работах было показано, что данное явление представляет собой электромеханические автоколебания, возникающие вследствие того, что электрическое поле, вызывающее возникновение автоэмиссионного тока, приводит также к механической деформации упругого эмиттера.

В последнее время было продемонстрировано, что при определенных условиях автоколебания могут наблюдаться не только для достаточно гибких катодов на основе УНТ или нанопроволок, но и для алмазных микроразмерных эмиттеров, обладающих высоким значением модуля упругости и достаточно высокой жесткостью [9]. Также были получены свидетельства того, что эффект автоколебаний может являться одной из причин деградации свойств автокатодов на основе УНТ [10, 11]. Было показано, что при автоэлектронной эмиссии из массива ориентированных УНТ, выращенных на плоской подложке, могут возникать автоколебания отдельных нанотрубок, амплитуда которых может становиться достаточно высокой и приводить к частичному или полному разрушению нанотрубки.

* E-mail: klesch@polly.phys.msu.ru

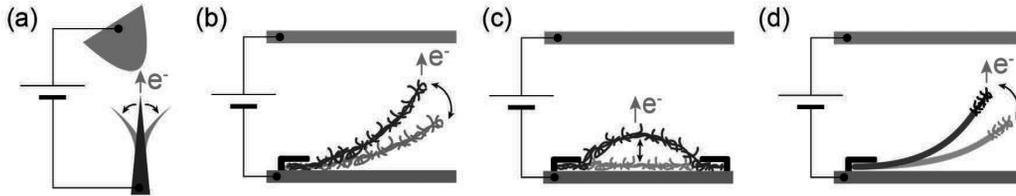


Рис. 1. Схемы экспериментов, в которых наблюдались электромеханические автоколебания автоэлектронных эмиттеров различного типа. *a* — Отдельный наноразмерный эмиттер. *b* — Эмиттер в виде УНТ-полоски, закрепленной за один конец. *c* — Эмиттер в виде УНТ-жгута, закрепленного за оба окончания. *d* — Эмиттер на основе металлической упругой проволоки с УНТ на окончании

В настоящей работе на основе характерных экспериментальных зависимостей проводится анализ общих свойств таких систем и закономерностей, определяющих процесс возбуждения в них автоколебаний, а также обсуждаются перспективы практического применения данного эффекта.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

2.1. Экспериментальные образцы автоколебательных систем

Как было указано во Введении, электромеханические автоколебания наблюдались экспериментально для автоэлектронных эмиттеров различного типа. Более того, геометрия эксперимента и условия измерений также могли существенно отличаться. На рис. 1 представлены схемы автоколебательных систем, которые были исследованы в работах [3–9]. В наиболее общем виде такие системы представляют собой вакуумный диод, на катоде которого закрепляется автоэлектронный эмиттер, обладающий определенной гибкостью и упругостью. В эксперименте между катодом и анодом диода прикладывается постоянное напряжение, достаточное для наблюдения автоэлектронной эмиссии.

На рис. 1 *a* представлена схема измерений, использованная при изучении наноразмерных эмиттеров, например, в виде отдельной УНТ [5], пучка УНТ [2] или нанопроволоки из карбида кремния [3]. В этом случае использовался анод в виде металлического острья, который располагался в непосредственной близости от вершины эмиттера, на расстоянии, не превышающем несколько микрометров.

В случае эмиттеров макроскопических размеров, например, в виде узких полосок, изготовленных из тонких мембран, или жгутов, скрученных из большого числа УНТ, автоколебания исследовались в схеме плоского вакуумного диода, как показано на рис. 1 *b, c*. Причем автоколебания наблюда-

лись при точечном креплении таких гибких эмиттеров на плоском основании как за одно окончание [7] (рис. 1 *b*), так и за оба [6] (рис. 1 *c*). Автоколебательный режим был также реализован для эмиттера в виде отрезка металлической проволоки с закрепленным на его окончании фрагментом УНТ-мембраны [8] (рис. 1 *d*). Параметры колебаний и условия их возбуждения определялись в данном случае комбинацией упругих свойств проволоки и автоэмиссионных характеристик УНТ.

В настоящей работе рассматриваются результаты экспериментов, проведенных для эмиттеров, изготовленных из материалов двух типов, механические свойства которых значительно различались. Одна из исследованных разновидностей эмиттеров представляла собой иглоподобный кристаллит алмаза (микроиглу) с монокристаллической структурой длиной 100 мкм, толщиной вблизи основания около 1 мкм и радиусом окончания около 10 нм (рис. 2 *a*). Подробное описание методики изготовления алмазных микроигл и их структурных свойств представлено в работах [12, 13]. Значение модуля упругости таких микроигл соответствует значению, характерному для объемного монокристаллического алмаза, а типичное значение добротности колебаний микроиглы, закрепленной за основание, составляет порядка 1000 [9]. Второй тип эмиттеров, исследуемых в данной работе, представлял собой полоску длиной 5 мм и шириной 0.5 мм, вырезанной из тонкой мембраны, которая на 99 % состояла из переплетенных между собой одностенных УНТ (ОУНТ) и имела толщину порядка 0.1 мкм (рис. 3 *a*). Методика изготовления и структура таких ОУНТ-мембран подробно описаны в работах [7, 14]. Эмиттеры в виде ОУНТ-полосок обладали гораздо более низким значением модуля упругости по сравнению с алмазными микроиглами, а значение добротности колебательной системы из таких полосок, закрепленных за одно из окончаний, типично не превышало 10.

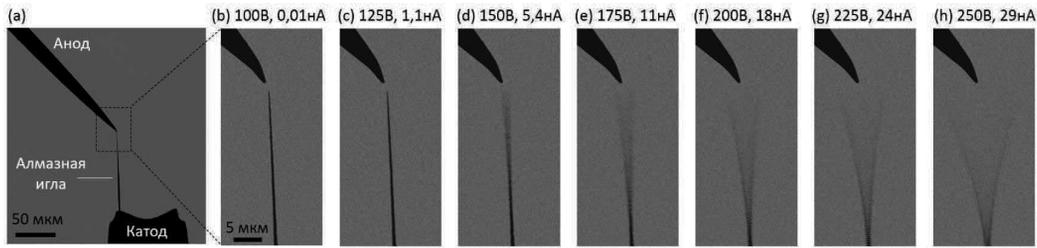


Рис. 2. *a* — РЭМ-изображение расположения элементов при автоэмиссионном эксперименте с алмазной микроиглой. *b–h* — РЭМ-изображения окончания алмазной микроиглы (катода) и вольфрамового анода при различных значениях приложенного напряжения и автоэмиссионного тока

2.2. Эмиттеры на основе алмаза

Результаты экспериментов с алмазной микроиглой представлены на рис. 2. В этом случае эксперимент проводился по схеме, показанной на рис. 1 *a*, внутри камеры растрового электронного микроскопа (РЭМ, модель FEI Versa 3D) при уровне вакуума порядка 10^{-6} Торр. В качестве анода использовалась заостренная вольфрамовая проволока, окончание которой располагалось на расстоянии нескольких микрометров от вершины алмазной микроиглы.

При приложении к диоду постоянного напряжения из окончания алмазной микроиглы наблюдалась автоэлектронная эмиссия, значение тока которой измерялось с помощью пикоамперметра (модель Keithley 6487). При превышении определенного порогового значения напряжения наблюдались стабильные незатухающие механические колебания окончания иглы с частотой около 1.4 МГц, близкой к собственной частоте микроиглы. Амплитуда колебаний увеличивалась с увеличением напряжения, которое приводило также к возрастанию автоэмиссионного тока, как показано на рис. 2 *b–h*. Пороговое напряжение возникновения автоколебаний в представленном случае составляло 150 В. При напряжении 250 В максимальное отклонение окончания иглы от ее оси составляло около 20° , что близко к предельной деформации, при которой высока вероятность отламывания иглы в месте наибольшего механического напряжения. Важно отметить, что значения измеряемого автоэмиссионного тока не изменялись при выключении электронного пучка микроскопа. Это означает, что колебания не связаны с действием электронного пучка, как, например, наблюдалось в работе [15]. Поэтому в рассматриваемой системе имеют место именно автоколебания, поддерживаемые за счет приложенного постоянного напряжения.

2.3. Эмиттеры на основе ОУНТ

Результаты измерений с эмиттером в виде тонкой ОУНТ-полоски представлены на рис. 3. Эксперименты проводились по схеме, представленной на рис. 1 *b*. ОУНТ-полоска закреплялась на плоском металлическом основании за один из концов с помощью проводящего графитового скотча. Основание с полоской мембраны закреплялось на держателе катода в измерительной вакуумной ячейке параллельно плоскому металлическому аноду на расстоянии

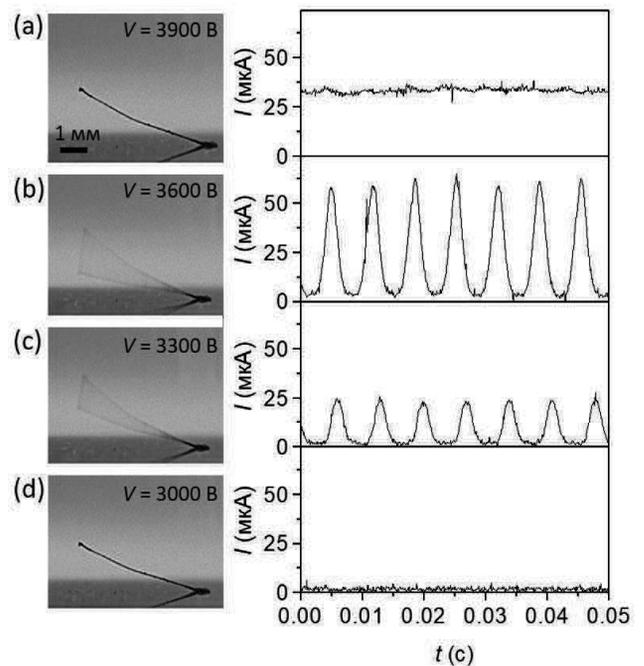


Рис. 3. *a–d* — Фотографии эмиттера в виде УНТ-полоски и соответствующие зависимости автоэмиссионного тока от времени при различных значениях приложенного постоянного напряжения. В нижней части фотографий видно отражение полоски УНТ от зеркальной поверхности металлического основания

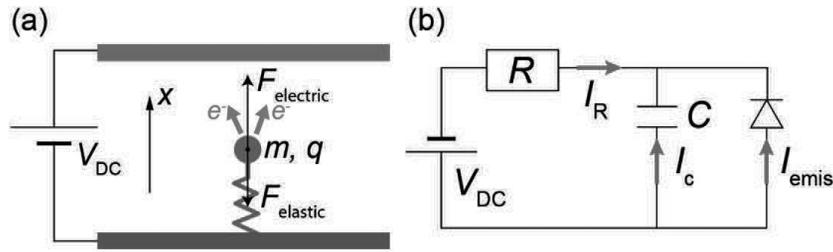


Рис. 4. *a* — Эмпирическое представление системы с гибким автоэлектронным эмиттером. *b* — Эквивалентная электрическая схема системы

10 мм. Исследования проводились при уровне вакуума в ячейке 10^{-6} Торр.

При приложении постоянного напряжения между катодом и анодом незакрепленный конец полоски отклонялся в сторону анода под действием электростатических сил (рис. 3 *d*). С увеличением напряжения изгиб мембраны увеличивался и при напряжении 3000 В возникала автоэлектронная эмиссия из ОУНТ, находящихся на конце полоски. При напряжении 3300 В автоэмиссионный ток достигал величины 25 мкА и конец полоски начинал осциллировать, как показано на рис. 3 *c*. Зависимость автоэмиссионного тока от времени, регистрировавшаяся с помощью осциллографа, имела вид негармонических периодических колебаний (рис. 3 *c, b*). Частота колебаний в данном случае составляла 140 Гц. Амплитуда колебаний увеличивалась с увеличением напряжения, однако при превышении некоторого порогового значения напряжения около 3900 В колебания не наблюдались (рис. 3 *a*). Таким образом, в данном случае автоколебания в системе возникали только в определенном диапазоне напряжений.

3. МОДЕЛЬ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Эмпирическая модель, описывающая электромеханические процессы в системе с гибким автоэлектронным эмиттером, была предложена ранее в работах [4, 7]. В настоящей работе данная модель используется для проведения анализа экспериментальных данных и определения необходимых общих условий для реализации автоколебательного режима.

Для описания общих закономерностей в исследуемых автоколебательных системах рассмотрим одномерный случай движения материальной точки под действием электрического поля (рис. 4 *a*). Уравнение движения для материальной точки с эффек-

тивной массой m и координатой x можно записать в общем виде

$$m\ddot{x} = F_{electric} + F_{elastic} + F_{friction}.$$

Здесь

$$F_{elastic} = m\omega_0^2 x$$

— сила упругости, определяемая собственной частотой $f_0 = \omega_0/2\pi$;

$$F_{friction} = m(\omega_0/Q)\dot{x}$$

— линейная по скорости сила внутреннего трения, определяемая добротностью Q ;

$$F_{electric} = dW/dx$$

— электростатическая сила (сила Кулона), которая связана с электростатической энергией $W = C(x)V^2/2$, определяемой напряжением на эмиттере V и его эффективной емкостью $C(x)$, зависящей от координаты x . Напряжение на эмиттере V связано с напряжением V_{DC} , которое прикладывается к обкладкам конденсатора, уравнением Кирхгофа

$$I_{emis} + I_C = I_R$$

для эквивалентной электрической схемы системы, представленной на рис. 4 *b*. Здесь I_{emis} — ток автоэлектронной эмиссии,

$$I_C = \frac{d(C(x)V)}{dt}$$

— емкостный ток,

$$I_R = \frac{V_{DC} - V}{R}$$

— ток через тело эмиттера с сопротивлением R . Анализ уравнения движения при подстановке в него малых гармонических колебаний координаты

$$x(t) = X_0 + X \cos(\omega_0 t)$$

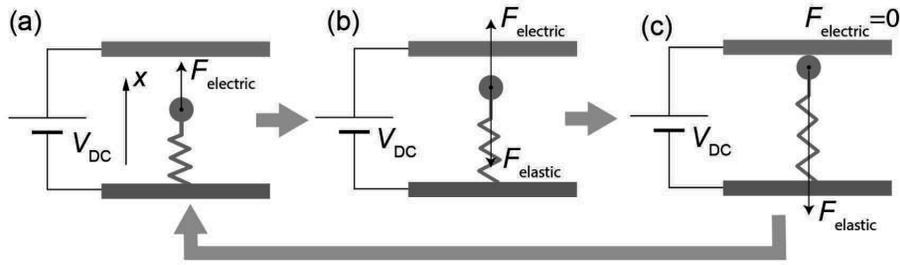


Рис. 5. a–c — Схема движения материальной точки под действием электростатической и упругой сил

и напряжения вблизи положения равновесия

$$V(t) = V_0 + V \cos(\omega_0 t + \phi_0)$$

показывает, что эффективный коэффициент затухания в системе может быть записан в виде

$$\gamma = \gamma_0 - \Delta\gamma(V) = \frac{\omega_0}{Q} - \text{const} \frac{\partial I / \partial x}{1 + (\omega_0 \tau)^{-2}} V. \quad (1)$$

В данной формуле введены следующие обозначения: γ_0 — коэффициент затухания собственных механических колебаний, $\Delta\gamma(V)$ — изменение коэффициента затухания за счет наличия автоэмиссионного тока. Константа

$$\text{const} = C'(m\omega_0^2 C)^{-1},$$

входящая в выражение для $\Delta\gamma$, включает параметры, не зависящие от напряжения. Постоянная времени

$$\tau = R_\Sigma C = \left(\frac{\partial I}{\partial V} + \frac{1}{R} \right)^{-1} C$$

определяется как сопротивлением эмиттера R , так и дифференциальным сопротивлением $(\partial I / \partial V)^{-1}$, т. е. крутизной вольт-амперной характеристики автоэлектронной эмиссии.

Из формулы (1) видно, что при определенных значениях параметров системы коэффициент трения γ может принимать отрицательные значения. В этом случае происходит самовозбуждение системы и колебания становятся нарастающими по амплитуде. Благодаря наличию нелинейных членов в исходном уравнении движения, может происходить стабилизация амплитуды колебаний, и в результате будут наблюдаться автоколебания, т. е. стабильные колебания в системе с диссипацией, поддерживаемые за счет внешнего источника энергии (источника постоянного напряжения) [16].

Роль автоэмиссионного тока может быть наглядно продемонстрирована с помощью модельной системы, изображенной на рис. 5, в которой в процессе движения материальной точки под действием электростатической и упругой сил возможен ее непосредственный контакт с анодом. На рис. 5 a–c показаны схемы, соответствующие движению материальной точки в сторону анода. В момент касания электростатическая сила становится равной нулю, так как весь заряд материальной точки практически мгновенно «стекает» на анод. После касания материальная точка будет двигаться в противоположном направлении под действием силы, возникающей из-за упругой деформации, до тех пор, пока ее заряд не восстановится, после чего процесс повторится вновь. Время обратного движения и, соответственно, период колебаний в такой системе будет определяться постоянной времени RC , т. е. характерным временем зарядки емкости системы.

В системе с автоэмиссионным катодом, когда вместо касания анода при определенном значении напряжения возникает автоэлектронная эмиссия, заряд эмиттера также начинает «стекать» на анод, но не мгновенно, а в соответствии с величиной эмиссионного тока, определяемого вольт-амперной характеристикой $I(V)$. Стеkanie заряда за счет автоэмиссионного тока, уменьшая напряжение на эмиттере и, соответственно, величину электростатической силы, как бы «толкает» материальную точку в направлении от анода, за счет чего и реализуется положительная обратная связь в системе. Таким образом, автоэмиссионный ток играет роль нелинейного элемента, который является неотъемлемой частью любой автоколебательной системы [16]. При этом, как будет показано в следующем разделе, определяющую роль для возникновения автоколебаний играет соотношение между постоянной времени $\tau = R_\Sigma C$ и периодом собственных колебаний гибкого катода $2\pi\omega_0^{-1}$.

4. УСЛОВИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ АВТОКОЛЕБАНИЙ

Как обсуждалось выше, автоколебания возникают, когда значение эффективного коэффициента затухания становится отрицательным. Полученная формула (1) позволяет сформулировать физические причины появления автоколебаний, т. е. условия, при которых изменение коэффициента затухания $\Delta\gamma$, возникающее за счет наличия автоэмиссионного тока, превышает коэффициент затухания механических колебаний эмиттера $\gamma_0 = \omega_0/Q$. Типичный вид функции $\Delta\gamma(V_{DC})$ представлен на рис. 6 для параметров, соответствующих экспериментам с УНТ-полосками.

При значении добротности $Q = 10$, полученном в эксперименте, кривая $\Delta\gamma$ пересекает уровень γ_0 в точках V_{min} и V_{max} , являющихся границами диапазона, в котором возникают автоколебания. Добротность характеризует внутреннее трение в системе, и при более низких значениях Q (например, при $Q = 5$ на рис. 6 а) коэффициент затухания всюду положителен и автоколебаний не возникает. В то же время в случае низкого трения (например, при $Q = 50$ на рис. 6 а) автоколебания наблюдаются во всем диапазоне напряжений, превышающих пороговое напряжение. Последний случай соответствует эксперименту с алмазной микроиглой, в котором добротность была значительно выше, чем для ОУНТ-полоски, и автоколебания не исчезали с увеличением напряжения вплоть до предельных значений автоэмиссионного тока и амплитуды колебаний.

На рис. 6 б представлена зависимость величины $\omega_0\tau$ от приложенного напряжения. Видно, что автоколебания возникают при условии $\omega_0\tau \sim 1$, т. е. когда характерное время зарядки емкости системы одного порядка с периодом собственных колебаний гибкого автокатода. В области низких напряжений величина τ постоянна, так как $R_{\Sigma} \approx R$, и принимает максимальное значение $\tau = RC$. При увеличении напряжения возникает автоэмиссионный ток и τ уменьшается, так как процесс перезарядки емкости системы ускоряется за счет уменьшения величины дифференциального сопротивления $(\partial I/\partial V)^{-1}$. В пределе при высоких напряжениях $R_{\Sigma} = (\partial I/\partial V)^{-1}$, так что R_{Σ} стремится к нулю. Поэтому условие $\omega_0\tau \sim 1$ выполняется, когда сопротивление эмиттера R и дифференциальное сопротивление $(\partial I/\partial V)^{-1}$ имеют один порядок величины.

Величина $\Delta\gamma$ в формуле (1) определяется произведением функций $1/[1 + (\omega_0\tau)^{-2}]$ и $\partial I/\partial x$, типичные графики которых представлены на рис. 6 в. Вид-

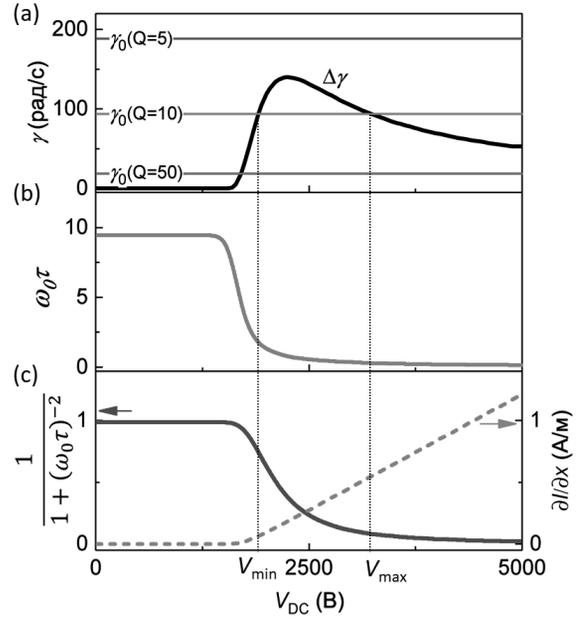


Рис. 6. а-с — Зависимости различных членов, входящих в формулу (1), от приложенного напряжения при значениях параметров модели, соответствующих эксперименту с ОУНТ-полоской

но, что выражение $1/[1 + (\omega_0\tau)^{-2}]$, как и $\omega_0\tau$, стремится к нулю с увеличением напряжения. Производная тока $\partial I/\partial x$, напротив, увеличивается при увеличении напряжения. Поэтому произведение этих двух функций максимально в некотором диапазоне напряжений, в котором оказывается возможным возникновение автоколебаний.

Важно отметить, что большое значение производной $\partial I/\partial x$, которое характеризует степень изменения автоэмиссионного тока при отклонении эмиттера от положения равновесия, может обеспечивать возможность наблюдения автоколебаний для образцов, имеющих относительно высокую жесткость, как это имеет место для случая алмазной микроиглы (рис. 2). Действительно, за счет выбранной геометрии анода, выполненного в виде острия, относительно небольшое отклонение алмазной микроиглы от положения равновесия приводит к значительному изменению автоэмиссионного тока, за счет изменения расстояния между его окончанием и анодом. Также большое значение $\partial I/\partial x$ обеспечивает более высокую эффективность преобразования приложенного постоянного напряжения в переменное, что может быть важным при практическом применении рассматриваемых автоколебательных систем.

Таким образом, анализ формулы (1) показывает, что для достижения отрицательной величины эффективного коэффициента затухания пред-

почтительно выполнение условий $(\partial I/\partial V)^{-1} \sim R$ и $\omega_0\tau \sim 1$, при этом параметры $\partial I/\partial x$, Q , C' должны иметь максимально возможное значение, а значения параметров ω_0 , m , C должны быть минимальны. При отрицательном коэффициенте затухания амплитуда колебаний возрастает со временем, так что колебания перестают быть малыми, и дальнейшее поведение системы можно установить, решая исходное нелинейное уравнение движения. Со временем, за счет наличия нелинейных членов, происходит стабилизация амплитуды колебаний. Характеристики установившихся автоколебаний определяются конкретным видом зависимостей параметров системы (емкость, напряженность поля и пр.) от координаты и напряжения. В общем случае частота автоколебаний оказывается несколько выше собственной частоты гибкого автокатода из-за дополнительного механического напряжения, создаваемого в результате его деформации под действием электростатической силы. Амплитуда, как и частота автоколебаний, возрастает с ростом электрического напряжения и в значительной степени определяется зависимостью автоэмиссионного тока от координаты.

Представленная модель достаточно хорошо описывает экспериментально наблюдаемые зависимости как для макроскопических эмиттеров на основе мембран и жгутов из УНТ, так и для микро- и наноразмерных эмиттеров в виде отдельной алмазной иглы, углеродной нанотрубки или полупроводниковой нанопроволоки. Таким образом, явление электромеханических автоколебаний в системах с гибкими автокатадами носит общий характер и может наблюдаться для автокатодов любого типа и размера, при выполнении определенных условий и параметрах системы, обеспечивающих отрицательное значение эффективного коэффициента затухания.

5. ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

Значительный интерес может представлять практическое использование автоколебаний гибких автокатодов в различных микро- и нанoeлектромеханических системах. Такие устройства не будут нуждаться во внешнем источнике переменного тока и могут использоваться аналогично активным элементам микроэлектроники. Прежде всего, такой интерес связан с потенциальной возможностью создания генераторных устройств

непосредственно на микроуровне. Кроме того, примерами электромеханических устройств на основе рассматриваемого эффекта могут быть преобразователи постоянного напряжения в переменное, генераторы тактовых импульсов и т.п. Более того, при использовании наноразмерных эмиттеров частоты электромеханических колебаний могут достигать величины, соответствующей микроволновому диапазону электромагнитного излучения. Действительно, в экспериментах с алмазными микроиглами, характерный поперечный размер которых составляет порядка 1 мкм, частоты колебаний лежали в диапазоне от 100 кГц до нескольких МГц. Частота колебаний в первом приближении обратно пропорциональна характерному размеру системы, поэтому для отдельного эмиттера диаметром 1 нм (например, для отдельной углеродной нанотрубки) частота автоколебаний будет лежать в диапазоне от 100 МГц до нескольких ГГц. Эта оценка совпадает со значениями резонансных частот для отдельных нанотрубок, которые типично регистрируются экспериментально при возбуждении внешним переменным электрическим полем [17]. В случае возбуждения автоколебаний в процессе автоэлектронной эмиссии из отдельной нанотрубки заряд, находящийся на ее окончании, будет генерировать высокочастотное электромагнитное поле в окружающем пространстве. Движение электронов, создающее электромагнитную волну, в данном случае будет обусловлено в основном механическим движением окончания эмиттера, а не электрическим током, как это происходит в стандартной передающей антенне. Таким образом, при использовании автоколебательных электромеханических систем потенциально возможно создание наноразмерных источников электромагнитных волн и передающих антенн на их основе, которые могут быть полностью интегрированы в различные микроэлектронные устройства. Кроме того, наличие таких источников позволяет также интегрировать различные нанoeлектромеханические устройства на основе отдельных углеродных нанотрубок, которые используют в своей работе внешние макроскопические генераторы высокочастотных колебаний. К таким устройствам относятся, к примеру, сверхчувствительные сенсоры массы или силы, создаваемые на основе отдельных осциллирующих углеродных нанотрубок или пленок графена [18, 19], устройства передачи и приема радиосигналов на наноразмере [20, 21], генераторы тактовой частоты [22], электронные логические элементы [23] и другие.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследован эффект электромеханических автоколебаний, возникающих в системах с гибкими автоэлектронными эмиттерами. Рассмотрены основные типы систем, для которых наблюдается данный эффект, и представлены результаты экспериментов для двух репрезентативных разновидностей эмиттеров на основе УНТ и алмазных микроигл, механические свойства которых имели значительные различия. С использованием разработанной математической модели рассматриваемых автоколебательных систем определены требования к механическим (добротность, собственная частота) и электронным (емкость, сопротивление, вольт-амперная характеристика) характеристикам системы, необходимым для возникновения в системе отрицательного эффективного коэффициента затухания, при котором реализуется автоколебательный режим. В частности, показано, что постоянная времени, определяющая характерное время перезарядки емкости системы, которая связана с электрическим сопротивлением эмиттера и крутизной вольт-амперной характеристики, должна иметь один порядок величины со значением периода собственных колебаний упругого автоэмиссионного катода. С практической точки зрения эффект автоколебаний может представлять значительный интерес в связи с возможностью создания на его основе микроэлектромеханических генераторных устройств, таких как преобразователи постоянного напряжения в переменное, генераторы тактовых импульсов, передающие антенны и др.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-72-10067).

ЛИТЕРАТУРА

- Z. L. Wang, R. P. Gao, W. A. de Heer, and P. Poncharal, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 856 (2002).
- Y. Saito, K. Seko, and J. Kinoshita, *Diam. Relat. Mat.* **14**, 1843 (2005).
- A. Ayari, P. Vincent, S. Perisanu, M. Choueib, V. Gouttenoire, M. Bechelany, D. Cornu, and S. T. Purcell, *Nano Lett.* **7**, 2252 (2007).
- T. Barois, S. Perisanu, P. Vincent, S. T. Purcell, and A. Ayari, *Phys. Rev. B* **88**, 195428 (2013).
- J. A. Weldon, B. Aleman, A. Sussman, W. Gannett, and A. K. Zettl, *Nano Lett.* **10**, 1728 (2010).
- V. I. Kleshch, A. A. Zakhidov, A. N. Obraztsov, E. D. Obraztsova, and R. H. Baughman, *Phys. Stat. Sol. B* **246**, 2658 (2009).
- V. I. Kleshch, A. N. Obraztsov, and E. D. Obraztsova, *JETP Lett.* **90**, 464 (2009).
- V. I. Kleshch, A. N. Obraztsov, and E. D. Obraztsova, *Carbon* **48**, 3895 (2010).
- V. I. Kleshch, R. R. Ismagilov, V. V. Mukhin, A. S. Orekhov, P. Poncharal, S. T. Purcell, and A. N. Obraztsov, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 144101 (2023).
- P. Vincent, F. Panciera, I. Florea, N. Blanchard, C. S. Cojocar, M. Ezzedine, H. Taoum, S. Perisanu, P. De Laharpe, A. Ayari, J. Chaste, K. Saidov, U. Mirsaidov, S. T. Purcell, and P. Legagneux, *Carbon* **213**, 118272 (2023).
- P. Vincent, F. Panciera, I. Florea, M. Ezzedine, M.-R. Zamfir, S. Perisanu, C. S. Cojocar, N. Blanchard, D. Pribat, S. Purcell, and P. Legagneux, *Proc. of 34th International Vacuum Nanoelectronics Conference* (2021).
- A. N. Obraztsov, P. G. Kopylov, B. A. Loginov, M. A. Dolganov, R. R. Ismagilov, and N. V. Savenko, *Rev. Sci. Instrum.* **81**, 013703 (2010).
- A. N. Obraztsov, P. G. Kopylov, A. L. Chuvilin, and N. V. Savenko, *Diam. Relat. Mat.* **18**, 1289 (2009).
- A. Lobach, N. Spitsina, S. Terekhov, and E. Obraztsova, *Phys. Sol. St.* **44**, 475 (2002).
- P. Vincent, S. Perisanu, A. Ayari, M. Choueib, V. Gouttenoire, M. Bechelany, A. Brioude, D. Cornu, and S. Purcell, *Phys. Rev. B* **76**, 085435 (2007).
- Г. С. Горелик, *Колебания и волны. Введение в акустику, радиофизику и оптику*, Физматлит, Москва (2007).
- T. Natsuki, *Electronics* **6**, 56 (2017).
- K. Jensen, K. Kim, and A. Zettl, *Nat. Nanotechnol.* **3**, 533 (2008).
- J.-X. Shi, X.-W. Lei, and T. Natsuki, *Sensors* **21**, 1907 (2021).
- K. Jensen, J. Weldon, H. Garcia, and A. Zettl, *Nano Lett.* **7**, 3508 (2007).
- P. Vincent, P. Poncharal, T. Barois, S. Perisanu, V. Gouttenoire, H. Frachon, A. Lazarus, E. de Langre, E. Minoux, and M. Charles, *Phys. Rev. B* **83**, 155446 (2011).
- Y. Saito, *Nanostructured Carbon Electron Emitters and Their Applications*, CRC Press (2022).
- Y. V. Pershin and S. Shevchenko, *Nanotechnology* **28**, 075204 (2017).

МОЛЕКУЛЫ ИЗ ОТТАЛКИВАЮЩИХСЯ АТОМОВ, АДСОРБИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ И НИТИ

А. В. Максимычев^{a*}, Л. И. Меньшиков^{a,b**}, П. Л. Меньшиков^{a,b***}

^a Московский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

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

Поступила в редакцию 2 февраля 2024 г.,
после переработки 2 февраля 2024 г.
Принята к публикации 8 февраля 2024 г.

Рассмотрено взаимодействие двух медленных атомов, адсорбированных на поверхности или нити. Показано, что при любом знаке длины рассеяния у этой системы имеется связанное состояние. В частности, такое состояние существует для двух атомов с взаимодействием в виде сферического потенциала с бесконечно высокой стенкой.

DOI: 10.31857/S004445102406004X

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним их неожиданных результатов квантовой механики является эффект Ефимова – наличие связанных состояний в системе трех отталкивающихся частиц [1] (см. также работы [2–5]). В данной статье, являющейся дальнейшим развитием работы [6], указано на похожее явление: на возможность существования связанного состояния (ван-дер-ваальсовой молекулы) из отталкивающихся атомов, адсорбированных на поверхности или нити, играющих роль третьего тела.

В работе [6] рассмотрена пара таких атомов с массой m , взаимодействующих с поверхностью осциллятором потенциалом

$$u(z) = m\omega^2 z^2/2$$

(ось z направлена перпендикулярно поверхности).

Известно [7], что длина рассеяния a является единственным параметром, который определяет взаимодействие двух атомов при низкой энергии. На этом основании для описания движения атомов авторы применили в [6] метод потенциалов нулевого

радиуса [8], т.е. на волновую функцию (ВФ) пары атомов $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ наложили граничное условие

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = \gamma. \quad (1)$$

Здесь

$$\varphi = r\psi, \quad \gamma = -1/a,$$

$$r = |\mathbf{r}|, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = (z, \boldsymbol{\rho}),$$

$z = z_1 - z_2$, $\boldsymbol{\rho} = (x_1 - x_2, y_1 - y_2)$ – двумерный вектор, характеризующий относительное движение атомов вдоль поверхности. Согласно [6] энергия диссоциации адсорбированной молекулы равна

$$D = \kappa^2,$$

где κ определяется из уравнения

$$f(\kappa) = \gamma. \quad (2)$$

График функции $f(\kappa)$ приведен на рис. 1 (здесь и далее используем единицы $\hbar = m = \omega = 1$).

Из формулы (2) и рис. 1 видно, что связанное состояние существует при любом знаке γ , несмотря на то, что при $\gamma > 0$ (в работе [6] этот случай назван отталкиванием) таких состояний у пары атомов в свободном пространстве нет. В работе [9] рассмотрено притягивающее взаимодействие между атомами в виде сферической ямы

$$V(r) = -u_0\theta(r_0 - r),$$

* E-mail: maksimychev.av@mipt.ru

** E-mail: mleonid1954@mail.ru

*** E-mail: menshikov2005@mail.ru

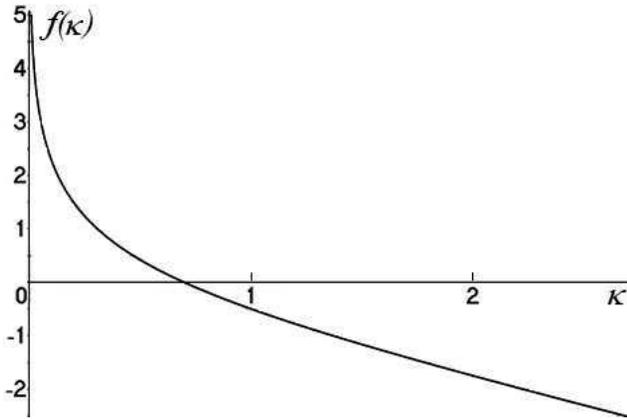


Рис. 1. График функции $f(\kappa)$ из (2)

где $u_0 > 0$, θ – функция Хевисайда. Указано, что в зависимости от значений параметров u_0 и r_0 возможен как случай $\gamma > 0$, так и $\gamma < 0$. Отсюда ясно, что случай $\gamma > 0$ не всегда соответствует отталкиванию. Ясно, однако, что $\gamma > 0$ может соответствовать и явному отталкиванию атомов. Покажем это на примере заведомо отталкивательного взаимодействия

$$V(r) = +u_0\theta(r_0 - r). \tag{3}$$

2. ПРИБЛИЖЕНИЕ «ТВЕРДЫХ ШАРОВ» ДЛЯ АДсорбции НА ПЛОСКОСТЬ

Для пары свободных медленных атомов достаточно рассмотреть s -волну. В системе их центра масс

$$\varphi(r) = \text{Ash}(qr), \quad r < r_0,$$

$$\varphi(r) = \sin[k(r - r_0) + \eta], \quad r > r_0.$$

Здесь k^2 – кинетическая энергия относительного движения атомов, $q = \sqrt{u_0 - k^2}$. Сшивка ВФ на границе дает

$$\text{ctg } \eta = \frac{q}{k} \text{cth}(qr_0). \tag{4}$$

При $r > r_0$ получаем

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = k \text{ctg}[k(r - r_0) + \eta].$$

Условие $r \rightarrow 0$ в (1) теперь следует понимать как $r \ll 1/k$. Из (1) и (4) получаем

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\varphi'}{\varphi} = k \cdot \text{ctg}(-kr_0 + \eta). \tag{5}$$

Утверждения [6] верны, если

$$\gamma(\kappa) = \text{const}. \tag{6}$$

Это выполняется при

$$kr_0 \ll 1, \quad k \ll q_0, \tag{7}$$

где $q_0 = \sqrt{u_0}$. При этом

$$\gamma = q_0 \text{cth}(q_0 r_0). \tag{8}$$

Таким образом, если выполнено (6), что верно при условиях (7), то, согласно выводам работы [6], даже в случае (3) существует связанное состояние адсорбированной квазимолекулы.

Значению k соответствуют расстояния между атомами $r \sim 1/k$. Для движения вдоль оси x $r \sim 1$, поэтому из (7) получаем условия справедливости выводов данной работы:

$$r_0 \ll 1, \quad q_0 \gg 1, \tag{9}$$

или, в обычных единицах,

$$r_0 \ll \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad u_0 \gg \hbar\omega. \tag{10}$$

Из (8) и (9) заключаем

$$\gamma > q_0 \gg 1. \tag{11}$$

Согласно [6], в этом предельном случае

$$\kappa \sim \exp\left(-\gamma\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right), \tag{12}$$

поэтому, с учетом (11), приходим к выводу, что размер квазимолекулы, определяющий характерное расстояние для продольного движения, велик и составляет

$$r \sim \frac{1}{\kappa} \sim \exp\left(\gamma\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right) \gg 1.$$

Таким образом, для продольного движения условия выполнения (7) менее жесткие по сравнению с (10):

$$r_0 \ll \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \exp\left(\gamma\sqrt{\frac{\pi\hbar}{2m\omega}}\right),$$

$$u_0 \gg \hbar\omega \exp\left(\gamma\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}}\right).$$

Второе условие (10) в типичных условиях выполняется, а наиболее жестким является первое. Опираясь на известную устойчивость связанных состояний в двумерных и одномерных системах, можно утверждать, что такие состояния могут существовать в случае (3).

3. АДсорбация на нить

Теперь ось z направим вдоль нити, а для адсорбционного потенциала снова примем осцилляторное приближение

$$u(\rho) = \rho^2/2, \quad \rho^2 = x^2 + y^2.$$

Согласно формуле (8) из работы [6], ВФ относительного движения атомов дается выражением

$$\psi(\mathbf{r}) \propto G(\mathbf{r}),$$

где $G(\mathbf{r})$ находится из уравнения

$$\left(-\Delta_r + \frac{1}{4}\rho^2 - 1 + \kappa^2\right) G(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y).$$

Теперь надо перейти к фурье-преобразованию по z , после чего, аналогично [6], получаем, опуская постоянные множители

$$\psi = \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}(1 - e^{-2\tau})} \exp\left(-\kappa^2\tau - \frac{1}{4}\rho^2 \operatorname{cth} \tau - \frac{z^2}{4\tau}\right).$$

При подстановке в (1) здесь можно положить $\rho = 0$, так что $r = |z|$, а также применить тождество

$$\frac{1}{1 - e^{-2\tau}} = \frac{1}{2\tau} + \left(\frac{1}{1 - e^{-2\tau}} - \frac{1}{2\tau}\right).$$

Интеграл от первого слагаемого берется аналитически и равен

$$\frac{\sqrt{\pi}}{r} e^{-kr} \approx \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{r} - \kappa\right).$$

Второе же слагаемое несингулярно, и в нем можно положить $z = 0$. Это дает для нити уравнение (2), в котором

$$f(\kappa) = -\kappa + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} e^{-k^2\tau} \left(\frac{1}{1 - e^{-2\tau}} - \frac{1}{2\tau}\right).$$

График этой функции подобен приведенному на рис. 1, т. е. снова решение (2) имеется при любом знаке γ . При большом γ вместо экспоненциальной малости (12), характерной для двумерного случая, получаем степенную малость энергии связи $\kappa \approx 1/\gamma$

4. ВЫВОДЫ

Из сказанного выше заключаем, что ограничение движения атомов по одному или двум направлениям может привести к появлению отсутствующего у пары свободных атомов связанного состояния или к росту энергии связи уже образуемой ими квазимолекулы.

Применим нашу модель к описанию опытов [10–12] с двумерным газом спин-поляризованных атомов водорода, адсорбированных на поверхности жидкого гелия.

Для применимости приближения потенциалов нулевого радиуса (1) требуется, чтобы характерный размер r_0 парного взаимодействия $u(r)$ между атомами водорода в триплетном состоянии был мал как по сравнению с размахом z_{ads} колебаний атомов в адсорбционном потенциале ($r_0/z_{ads} \ll 1$), так и по сравнению с характерной длиной волны де Бройля атомов водорода в условиях опытов [10–12], то есть $kr_0 \ll 1$, где $k \sim \sqrt{2mT}/\hbar$ - характерный волновой вектор атомов водорода с массой m . Опыты ставились при температуре $T \sim 0.15$ К, поэтому $k \sim 6 \cdot 10^6$ см⁻¹. Согласно [13], при

$$r_0 = 7.85a_0, \tag{13}$$

где a_0 - боровский радиус, у потенциальной энергии $u(r)$ имеется минимум $u(r_0) = -u_0$, где $u_0 = 6.2$ К. В этом адсорбционном потенциале у атомов водорода имеется только одно связанное состояние с энергией связи $E_q = 1.14$ К [14]. Отсюда заключаем, что

$$z_{ads} \sim z_{in} + z_{out} \sim 20a_0,$$

где $z_{in} \sim 10a_0$ - характерный размах колебаний в классически доступной области движения атомов водорода в адсорбционном состоянии и $z_{out} \sim \hbar/\sqrt{2mE_a} \sim 10a_0$ - характерная глубина их проникновения под потенциальный барьер в классически недоступной области движения. Таким образом,

$$r_0/z_{ads} \sim 0.3. \tag{14}$$

Принимая (13) в качестве характерного размера парного взаимодействия между атомами водорода в триплетном состоянии, получаем

$$kr_0 \sim 0.2. \tag{15}$$

Добавим, что условие (15) позволяет также пренебречь поправочными слагаемыми $\sim kr_0$ к формуле (1) (см. [15], а также формулы 133.9, 133.10 и 133.14 из работы [16]).

В рамках принятого нами осцилляторного приближения для адсорбционного потенциала расстояние от адсорбционного уровня до дна ямы должно быть равно $\hbar\omega/2$. Согласно приведенным выше данным она составляет $u_0 - E_a \approx 5$ К, что соответствует $\omega \approx 1.3 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$. Отсюда находим использованную в расчетах единицу длины:

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \approx 4a_0.$$

Длина рассеяния атомов водорода в состоянии с суммарным спином $S = 1$ равна $a \approx 1.2a_0$ [17]. В наших единицах это равно $a \approx 0.3$, что соответствует

$$\gamma = -\frac{1}{a} \approx -3.3.$$

Из рис. 1 заключаем, что $\kappa \approx 2.5$, поэтому энергия связи адсорбированной квазимолекулы равна

$$D = \hbar\omega \cdot \kappa^2 \approx 60 \text{ К}.$$

Как отмечено в работе [6], этот вывод может свидетельствовать о неустойчивости боголюбовских двумерных бозе-конденсатов, полученных в опытах [10–12], образованных атомами водорода, адсорбированными на поверхности жидкого гелия

Финансирование. Работа проведена в рамках выполнения научного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Ефимов, ЯФ **12**, 1080 (1970).
2. С.П. Меркурьев, Л. Д. Фадеев *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, Москва (1985).
3. В. Б. Беляев *Лекции по теории малочастичных систем*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
4. Ф. М. Пеньков, ЖЭТФ **106**, 1046 (1994).
5. E. A. Kolganova, A. K. Motovilov, and W. Sandhas, *The ^4He trimer as an Efimov system*, Few-Body Systems **51**, 249 (2011).
6. А. В. Максимычев, Л. И. Меньшиков, П. Л. Меньшиков, Письма в ЖЭТФ **113**, 523 (2021).
7. П. В. Елютин, В. Д. Кривченко, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1976).
8. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, Издательство Ленинградского университета, Ленинград (1975).
9. А. С. Иоселевич, Письма в ЖЭТФ **113**, 854 (2021).
10. А. И. Сафонов, С. А. Васильев, И. С. Ясников, И. И. Лукашевич, С. Яккола, Письма в ЖЭТФ **61**, 998 (1995).
11. A. I. Safonov, S. A. Vasilyev, I. S. Yasnikov, E. Tjukanov, I. I. Lukashevich, S. Jaakkola, Czech. J. Phys. **46**, 539 (1996).
12. A. I. Safonov, S. A. Vasilyev, I. S. Yasnikov, I. I. Lukashevich, and S. Jaakkola, Phys. Rev. Lett. **81**, 4545 (1998).
13. W. Kołos and L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **43**, 2429 (1965).
14. A. I. Safonov, S. A. Vasilyev, A. A. Kharitonov, S. T. Boldarev, I. I. Lukashevich, and S. Jaakkola, Phys. Rev. Lett. **86**, 3356 (2001).
15. Л. Д. Ландау, Я. А. Смородинский, ЖЭТФ **14**, 269 (1944).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
17. E. Tiesinga, Phys. Rev. A **48**, 4801 (1993).

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ЧЕРНЫХ ДЫР И КРотовых НОР

*С. В. Чернов**

*Астрокосмический центр,
Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
117997, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 декабря 2023 г.,
после переработки 29 декабря 2023 г.
Принята к публикации 23 января 2024 г.

На примере метрики Лами исследуются поляризационные свойства черных дыр и кротовых нор. Строятся карты линейной поляризации и положения угла электрического вектора для тороидального и радиального распределений магнитного поля в тонких дисках. Используя данные результаты по будущим РСДБ-наблюдениям на «Телескопе горизонта событий» следующего поколения и космической миссии «Миллиметрон», можно будет определить, является ли источник черной дырой или кротовой норой.

DOI: 10.31857/S0044451024060051

1. ВВЕДЕНИЕ

Телескоп горизонта событий (ТГС) получил образ горячей замагниченной плазмы, излучающей синхротронное излучение вокруг сверхмассивных черных дыр в эллиптической галактике M87 [1] и в нашей галактике Млечный путь [2]. Образы образуют кольцоподобную морфологию и были получены в миллиметровом диапазоне на частоте 230 ГГц. Однако карты интенсивности несут значительно меньше информации, чем карты поляризации. Из-за этого не удается ограничить численные модели и определить параметры плазмы и черной дыры из наблюдений [3]. В 2021 г. по данным ТГС опубликована карта линейной поляризации сверхмассивной черной дыры в M87*, благодаря чему была открыта спиральная структура положения угла электрического вектора в горячей замагниченной плазме [4]. Поляризационная карта источника M87* сильно ограничила численные модели, в частности, было выяснено, что структура аккреционного потока лучше описывается режимом с захваченным магнитным полем (MAD), чем диском со стандартной и нормальной эволюцией (SANE) [5]. Поэтому поляриметрические наблюдения являются критически

важным шагом к пониманию физических процессов в сильном гравитационном поле.

Другой вопрос, который здесь возникает, действительно ли полученный образ в наблюдениях ТГС является образом черной дыры или является образом другого объекта, например, кротовой норы? Для того чтобы ответить на этот вопрос, необходимо критерий отличия черной дыры от кротовой норы. В данной работе предполагается, что отличить черную дыру от кротовой норы можно по линейной поляризации излучения.

Для построения поляризационных карт необходимо вычислить изменение поляризации вдоль траектории фотона. Как известно, поляризация излучения может изменяться по двум причинам. Первая — за счет поворота электрического вектора вдоль геодезической в сильном искривленном пространстве-времени. Вторая — за счет распространения фотона в замагниченной плазме. Здесь мы будем исследовать первую причину. Сильное искривленное пространство-время будет создаваться либо черной дырой, либо кротовой норой.

В данной статье на примере метрики Лами вычислено изменение вектора линейной поляризации при движении фотона в сильном гравитационном поле как для черной дыры, так и для кротовой норы. Для этого выбирается метрика, которая описывает как черные дыры, так и кротовые норы и в предельном случае совпадает с метрикой вращающейся черной дыры Керра. Построены карты линей-

* E-mail: chernov@lpi.ru

ной поляризации и положения угла электрического вектора в зависимости от направления магнитного поля в тонком диске. Рассмотрено тороидальное и радиальное распределение магнитного поля в тонких дисках. Вычислен коэффициент разложения β_2 линейной поляризации в зависимости от параметров метрики и дан критерий отличия черной дыры от кротовой норы.

В работе используется система единиц, в которой скорость света и гравитационная постоянная равны единице, $c = G = 1$. Размерность длины есть Gm/c^2 , размерность времени Gm/c^3 , где m — параметр массы.

2. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ФОТОНА

В данном разделе мы кратко опишем основные уравнения распространения луча света в искривленном пространстве-времени на примере метрики Лами.

Метрика Лами в координатах Бойера–Линдквиста (t, r, θ, ϕ) имеет вид [6]

$$ds^2 = - \left(1 - \frac{2rM(r)}{\Sigma} \right) dt^2 + \frac{\Sigma}{\Delta} dr^2 + \Sigma d\theta^2 + \frac{\sin^2 \theta}{\Sigma} ((r^2 + a^2)^2 - \Delta a^2 \sin^2 \theta) d\phi^2 - \frac{4raM(r) \sin^2 \theta}{\Sigma} dt d\phi, \quad (1)$$

где введены стандартные обозначения

$$\Sigma = r^2 + a^2 \cos^2 \theta,$$

$$\Delta = r^2 - 2rM(r) + a^2,$$

a — параметр вращения, спин. Эта метрика отличается от метрики вращающейся черной дыры Керра тем, что параметр массы M не является постоянной величиной, а есть функция радиальной координаты вида [6]

$$M(r) = m \frac{|r|^3}{|r|^3 + 2mb^2}. \quad (2)$$

В этом случае параметр m является постоянной величиной и мы будем называть его параметром массы, а параметр b , как было показано в работе [7], является магнитным зарядом. В случае, когда магнитный заряд равен нулю, $b = 0$, данная метрика совпадает с метрикой вращающейся черной дыры Керра. Без потери общности будем считать, что параметр массы равен единице, $m = 1$. Также

в данной работе будем рассматривать случай, когда магнитный заряд принимает значения от нуля до двойки, $0 \leq b \leq 2$. Как было показано в работе [6], данное многообразие является геодезически полным и несингулярным во всем пространстве-времени $-\infty < r < \infty$. Это означает, что два асимптотически плоских пространства-времени соединены между собой в точке $r = 0$. Из выражения (2) можно видеть, что величина $M(r) \geq 0$ всегда больше или равна нулю для любого радиуса, $-\infty < r < \infty$.

Метрика Лами обладает координатными особенностями, которые соответствуют горизонтам событий в случае метрике Керра. Эти условия определяются выражением вида

$$\Delta = r^2 - 2rM(r) + a^2 = 0.$$

В случае, когда оба параметра a и b не равны нулю, уравнение $\Delta = 0$ решается численно. На рис. 4 статьи [6] показаны случаи, когда данное уравнение либо не имеет корней, либо имеет один (экстремальный случай) или два корня. Данные корни уравнения $\Delta = 0$ будем называть горизонтами событий по аналогии с корнями уравнения в метрике Керра. Если метрика Лами обладает двумя или одним горизонтом событий, то данная метрика соответствует метрике черной дыры, в противном случае соответствует кротовой норе.

Фотоны распространяются в метрике Лами, движутся вдоль геодезических, которые описываются уравнениями вида

$$\begin{aligned} \frac{dx^\alpha}{d\tau} &= p^\alpha, \\ \frac{dp^\alpha}{d\tau} &= -\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha x^\beta x^\gamma, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha$ — символы Кристоффеля, p^α — 4-импульс фотона, τ — аффинный параметр. В статье [8] приведены метрические коэффициенты и символы Кристоффеля для метрики Лами (1) с функцией вида (2). Ниже мы покажем образы черных дыр и кротовых нор, полученные путем численного решения восьми уравнений (3). Качественно распространение фотонов в метрике Лами, по аналогии в метрике Керра, можно описать с помощью радиального и углового потенциала вида [3]

$$R(r) = (r^2 + a^2 - aL)^2 - \Delta (Q + (L - a)^2), \quad (4)$$

$$\Theta(\theta) = Q + \cos^2 \theta \left(a^2 - \frac{L^2}{\sin^2 \theta} \right), \quad (5)$$

где L — угловой момент фотона, Q — постоянная Картера. В метрике Керра ($b = 0$) радиальный

потенциал является полиномом четвертого порядка относительно радиальной координаты. В метрике Лами данный потенциал является полиномом седьмого порядка [6] и, как было показано в работе [6], некоторые фотонные траектории могут иметь более одной радиальной точки поворота.

Для определения положения образа на экране наблюдателя вводятся декартовы координаты (α, β) , впервые введенные в работе [9]. Эти координаты связывают сохраняющиеся параметры фотона (L, Q) с положением на экране наблюдателя:

$$\alpha = -\frac{L}{\sin \theta_o}, \quad \beta = \pm \sqrt{\Theta(\theta_o)}, \quad (6)$$

где θ_o — угол наклона наблюдателя к оси вращения черной дыры или кротовой норы. Таким образом, зная положение фотона на экране наблюдателя, можно определить параметры фотона (L, Q) , а следовательно, и положение источника фотона в диске.

Для построения карт поляризации нас будет, в первую очередь, интересовать поляризация фотона. Для вычисления изменения поляризации при движении фотона в сильном гравитационном поле воспользуемся постоянными Уокера – Пенроуза [10]. Для этого нам необходимо показать, что метрика Лами относится к типу D по квалификации Петрова [10]. Чтобы это показать, воспользуемся формализмом Ньюмена – Пенроуза. Данный формализм является тетрадным формализмом в изотропном базисе, состоящем из четверки изотропных векторов $(\mathbf{l}, \mathbf{n}, \mathbf{m}, \mathbf{m}^*)$ [10]. В Приложении задается четверка изотропных векторов, удовлетворяющих условиям ортогональности, изотропности и условию нормировки. Также выписываются коэффициенты вращения Риччи в метрике Лами, которые в данном формализме называются спиновыми коэффициентами [10]. В силу того, что спиновые коэффициенты в метрике Лами

$$\kappa = \sigma = \lambda = \nu = \varepsilon = 0 \quad (7)$$

равны нулю (см. Приложение), из следствия теоремы Гольдберга – Сакса следует, что метрика Лами относится к типу D по классификации Петрова [10]. Также в Приложении выписан не равный нулю вейлевский скаляр Ψ_2 . Все эти величины нам понадобятся для вычисления постоянных Уокера – Пенроуза.

Переходим к вычислению изменения вектора поляризации фотона при движении в искривленном пространстве-времени [10]. Пусть f^μ — 4-

вектор поляризации фотона, который ортогонален 4-импульсу фотона p^μ , т. е.

$$f^\mu p_\mu = 0,$$

и параллельно переносится вдоль фотонной траектории, т. е.

$$p^\mu \nabla_\mu f^\nu = 0.$$

Тогда величина

$$K_s = -p^i f^j (l_i n_j - l_j n_i - m_i m_j^* + m_i^* m_j) \Psi_2^{-1/3} \quad (8)$$

остаётся постоянной вдоль геодезической [10]. Величина

$$K_s = K_2 + iK_1$$

является постоянной комплексной величиной и называется постоянной Уокера – Пенроуза. Существование этой постоянной позволяет вычислить изменение 4-вектора поляризации вдоль траектории фотона и сравнить значения поляризации для случаев метрики черной дыры и кротовой норы. Для этого нам необходимо связать величины f и p возле наблюдателя и источника. Вводим обозначения

$$A = p^t f^r - p^r f^t + a \sin^2 \theta (p^r f^\phi - p^\phi f^r), \quad (9)$$

$$B = \sin \theta [(p^\phi f^\theta - p^\theta f^\phi)(r^2 + a^2) - a(p^t f^\theta - p^\theta f^t)]. \quad (10)$$

Тогда выражение (8) можно переписать в виде

$$K_2 + iK_1 = -(A - iB) \Psi_2^{-1/3}. \quad (11)$$

Значения 4-импульса в любой точке пространства-времени задается в Приложении формулами (38). Задавая начальное магнитное поле в точке излучения и вычисляя значения постоянных K_1 и K_2 , можно определить значения 4-вектора поляризации в точке наблюдателя, а следовательно, и параметры Стокса (см. (53) и (54)).

Другой важной величиной является коэффициент разложения линейной поляризации β_m , введенной в работе [11]:

$$\begin{aligned} \beta_m &= \frac{1}{I_{ann}} \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \int_0^{2\pi} P(\rho, \phi) P_m^*(\phi) \rho d\rho d\phi = \\ &= \frac{1}{I_{ann}} \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \int_0^{2\pi} P(\rho, \phi) e^{-im\phi} \rho d\rho d\phi, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$I_{ann} = \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \int_0^{2\pi} I(\rho, \phi) \rho d\rho d\phi, \quad (13)$$

$$P(\rho, \phi) = Q(\rho, \phi) + iU(\rho, \phi). \quad (14)$$

Здесь Q и U — параметры Стокса линейной поляризации, (ρ, ϕ) — полярные координаты на экране наблюдателя, звездочка «*» означает комплексное сопряжение, I_{ann} — интенсивность излучения. Без потери общности положим величину I_{ann} равной единице, $I_{ann} = 1$. Обозначим суммарную линейную поляризацию как

$$LP = \sqrt{Q^2 + U^2},$$

а положения угла электрического вектора как

$$EVPA = \frac{1}{2} \arctg \frac{U}{Q}. \quad (15)$$

В следующем разделе мы представим карты суммарной линейной поляризации и положения угла электрического вектора для радиального и тороидального магнитных полей в тонком диске, расположенном в экваториальной плоскости черной дыры или кротовой норы, и сравним полученные результаты.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В данном разделе мы обсудим разницу в картах линейной поляризации и положения угла электрического вектора для черной дыры и кротовой норы на примере метрики Лами.

Будем предполагать, что источником излучения фотонов является тонкий диск, расположенный в экваториальной плоскости черной дыры (кротовой норы), который излучает изотропно во все стороны. Тонкий диск пронизывает радиальное или тороидальное магнитное поле. Внутренний радиус диска задавался равным $r_{in} = 8$. Параметр вращения в метрике Лами задавался равным $a = 0.9$, а магнитный заряд — равным $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$. Случай, когда $b \lesssim 0.245$, соответствует черной дыре, а случай, когда $b \gtrsim 0.245$, — кротовой норе (см. рис. 4 из работы [6]). Величина 0.245 определяется численно из уравнения $\Delta = 0$ для спина $a = 0.9$. Наблюдатель расположен на расстоянии $r_o = 50$ от черной дыры (кротовой норы) под углом $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$ к оси вращения черной дыры (кротовой норы). Для построения карт поляризации использовался метод

обратной трассировки лучей. Уравнения геодезических (3) решались численно методом Рунге–Кутты четвертого порядка точности. Все карты поляризации показаны в масштабе от -10 до 10 в единицах Gm/c^2 и с разрешением 2500×2500 пикселей. Образы интенсивности для тех же параметров метрики показаны на рис. 3 в статье [8].

На рис. 1 и 2 показаны карты линейной поляризации для начального распределения радиального и тороидального магнитных полей соответственно. Цветом показан модуль линейной поляризации, величина LP. Зелеными стрелками показано направление электрического вектора линейной поляризации. Длина стрелки пропорциональна величине линейной поляризации. Три верхних рисунка соответствуют черной дыре, остальные — кротовой норе. Рисунки слева направо для разных углов наклона наблюдателя относительно оси вращения черной дыры (кротовой норы), $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$. Рисунки сверху вниз для разных величин магнитного заряда, $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$.

Из сравнения линейной поляризации для черных дыр и кротовых нор можно сделать следующие выводы. Линейная поляризация в фотонных кольцах для кротовых нор имеет большие значения, чем в диске. Это связано с тем, что для некоторых фотонов круговые орбиты расположены ближе к центру и, следовательно, гравитационное поле будет намного сильнее искривлять траекторию движения, а значит, и величину линейной поляризации. Данное утверждение справедливо как для радиального, так и для тороидального распределения магнитного поля в диске. Направления линейной поляризации (на рисунках обозначены зелеными стрелками) в фотонных кольцах будут приблизительно взаимно перпендикулярны для радиального и тороидального магнитных полей в случае, когда наблюдатель расположен под углом $i = 17^\circ$ к оси вращения черной дыры или кротовой норы. В случае, когда наблюдатель расположен под углом $i = 45^\circ$ или $i = 80^\circ$, угол между направлениями линейной поляризации для начального радиального и тороидального магнитных полей будет увеличиваться.

На рис. 3 и 4 показаны карты положения угла электрического вектора линейной поляризации для начального распределения радиального и тороидального магнитных полей соответственно. Цветом показана величина положения угла электрического вектора. Угол меняется от -90° до 90° . Сравнивая карты положения угла электрического вектора, можно сделать следующие выводы. Величина положения угла электрического вектора для радиально-

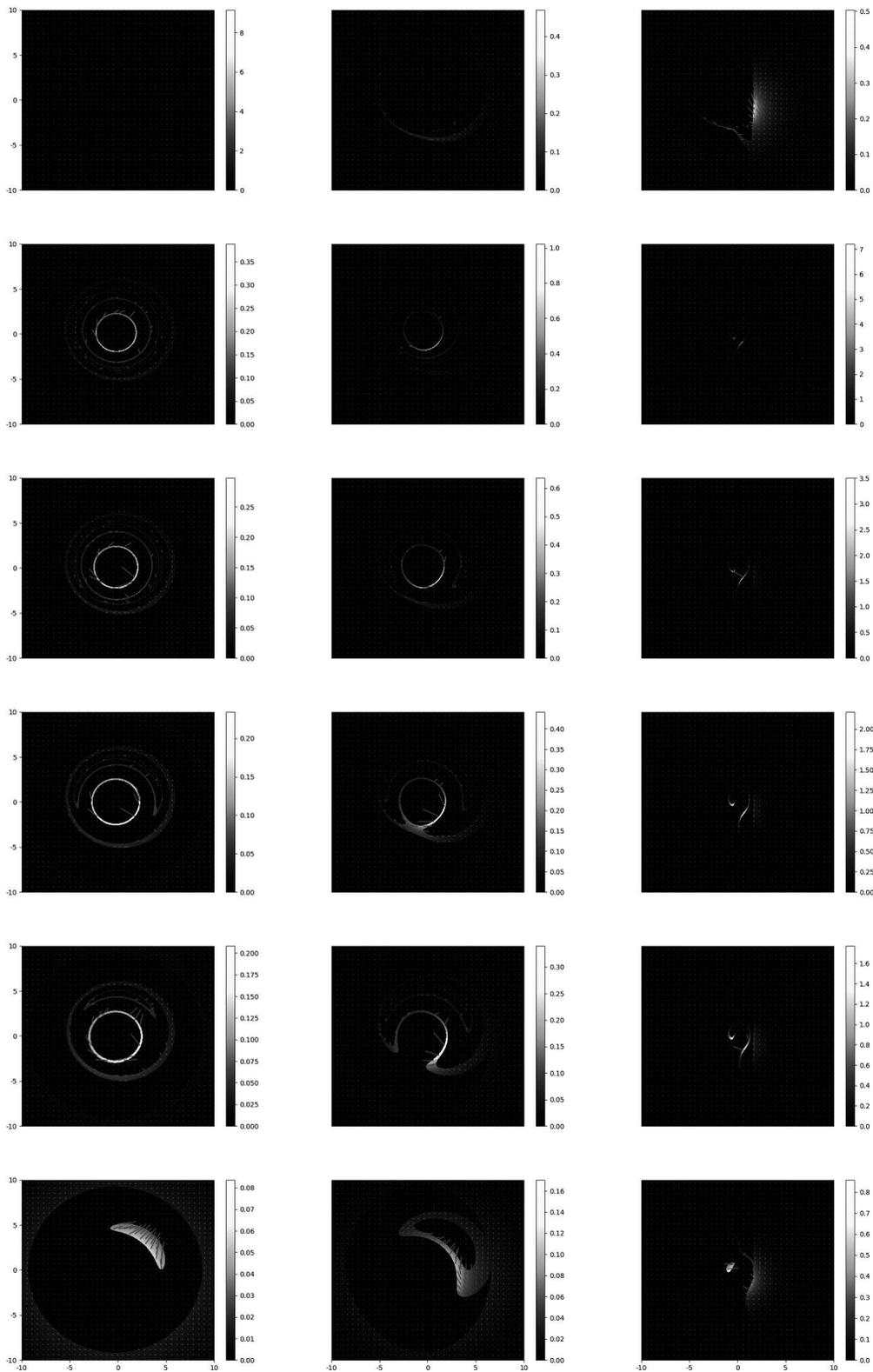


Рис. 1. Карта суммарной линейной поляризации (показана цветом) LP для начального радиального распределения магнитного поля вокруг черной дыры и кротовой норы. Слева направо углы наклона равны $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$. Сверху вниз магнитный заряд равен $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$. Масштаб карт от $-10 Gm/c^3$ до $10 Gm/c^3$

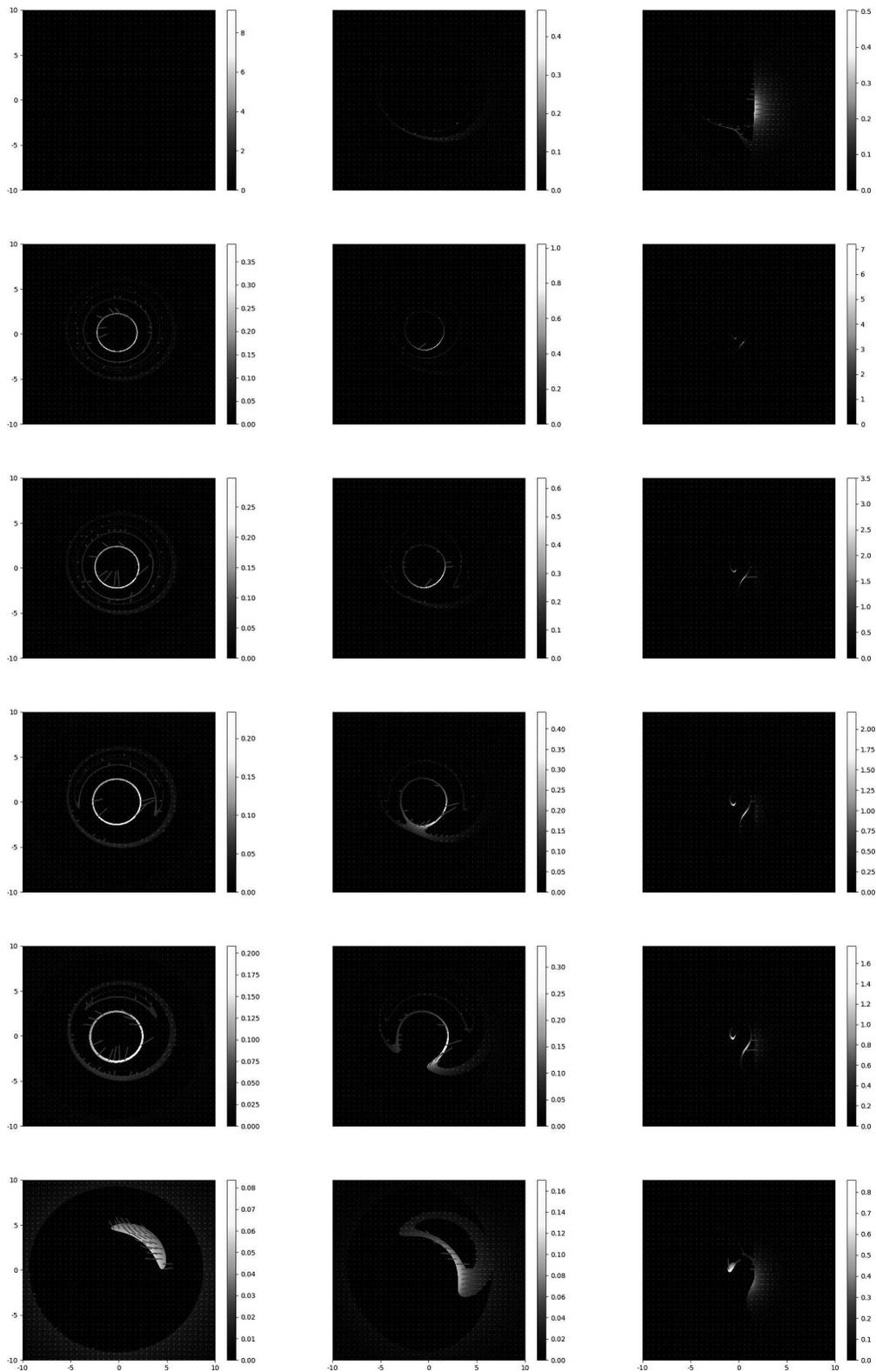


Рис. 2. Карта суммарной линейной поляризации (показана цветом) LP для начального тороидального распределения магнитного поля вокруг черной дыры или кротовой норы. Слева направо углы наклона равны $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$. Сверху вниз магнитный заряд равен $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$. Масштаб карт от $-10 Gm/c^3$ до $10 Gm/c^3$

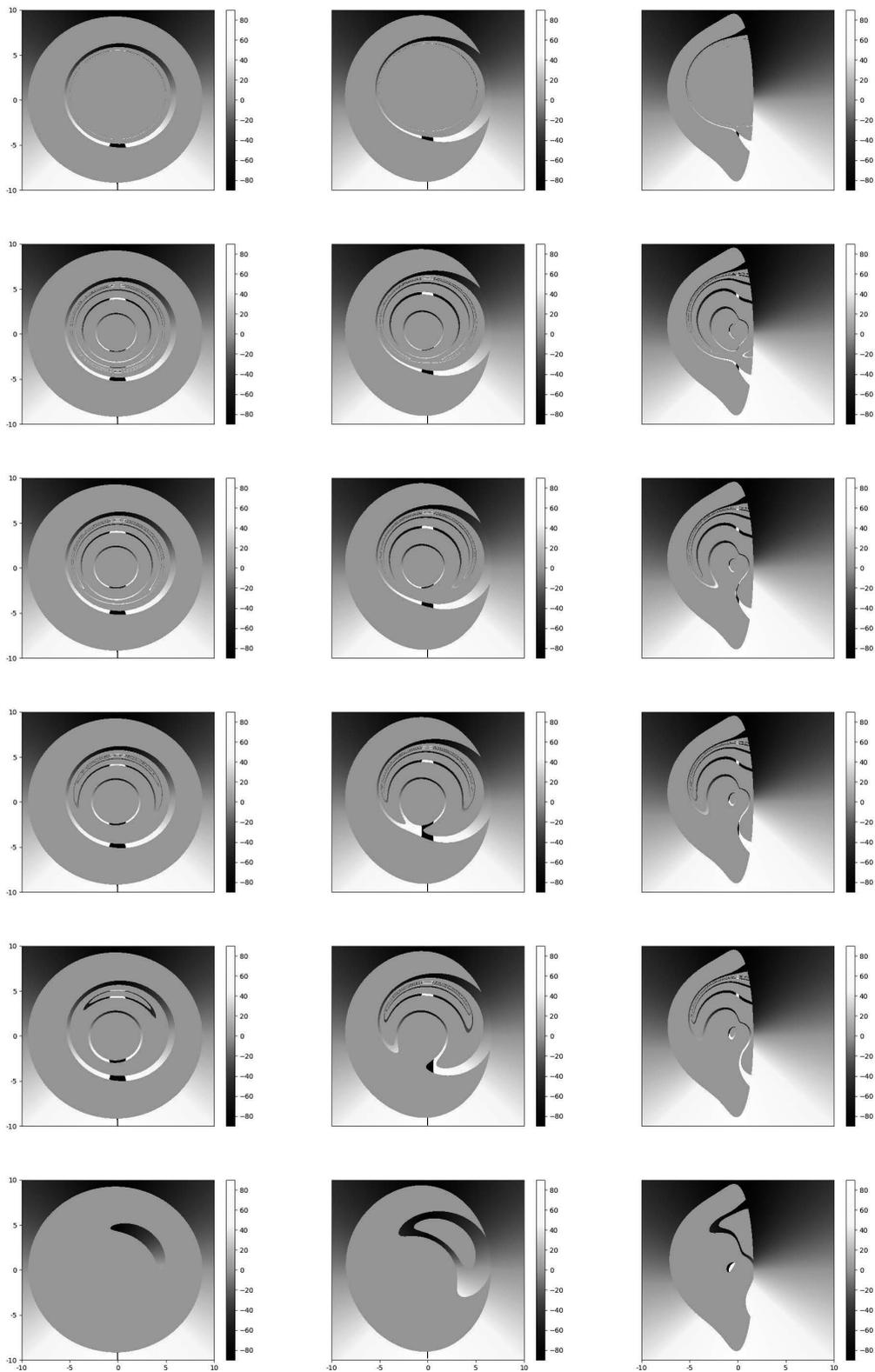


Рис. 3. Карта положения угла электрического вектора (показана цветом) для начального радиального распределения магнитного поля вокруг черной дыры или кротовой норы. Слева направо углы наклона равны $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$. Сверху вниз магнитный заряд равен $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$. Масштаб карт от $-10 Gm/c^3$ до $10 Gm/c^3$

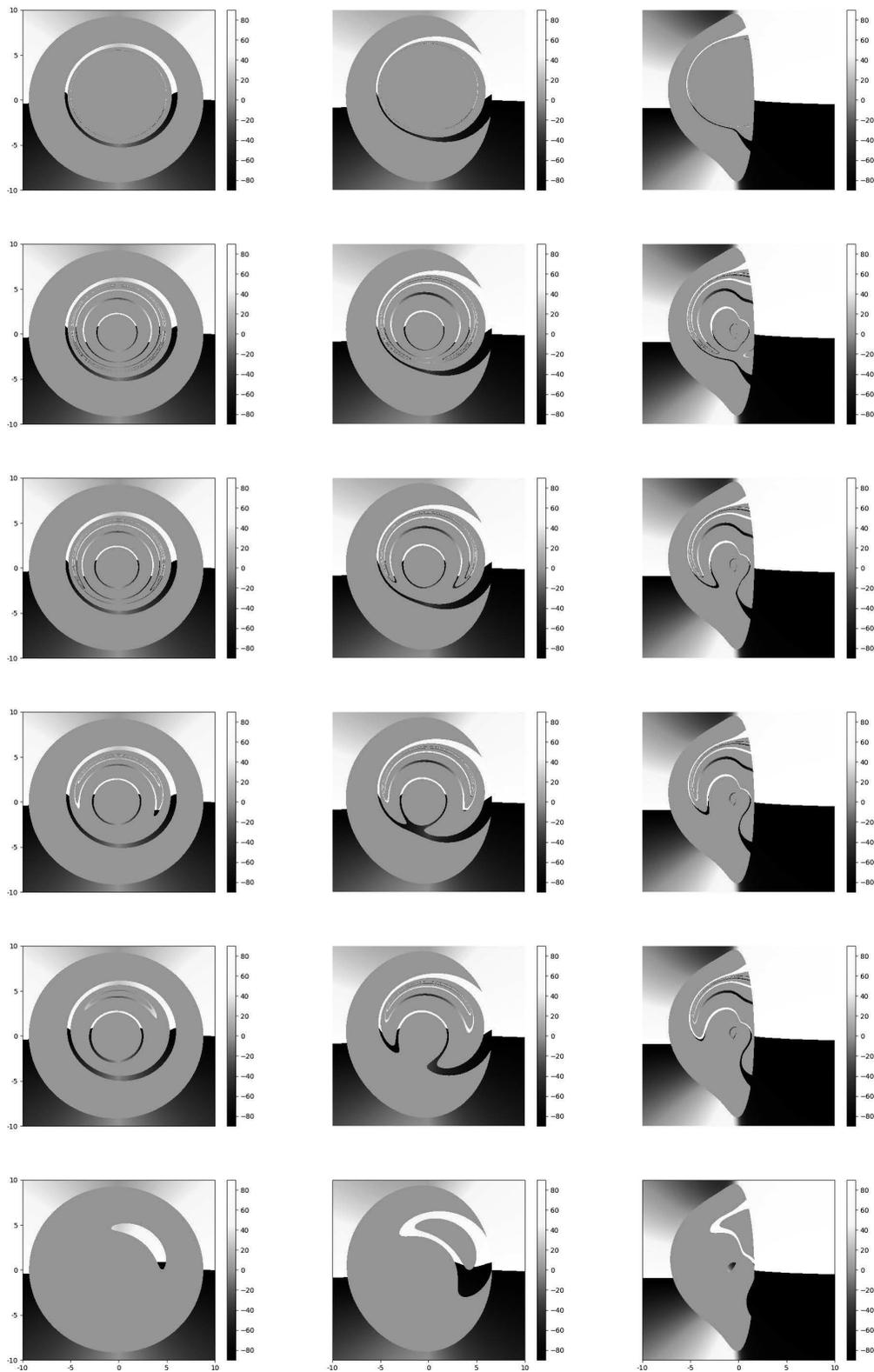


Рис. 4. Карта положения угла электрического вектора (показана цветом) для начального тороидального распределения магнитного поля вокруг черной дыры или кротовой норы. Слева направо углы наклона равны $i = 17^\circ, 45^\circ, 80^\circ$. Сверху вниз магнитный заряд равен $b = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 2.0$. Масштаб карт от $-10 Gm/c^3$ до $10 Gm/c^3$

го магнитного поля в диске отличается приблизительно на 90° от соответствующей величины для тороидального магнитного поля в диске. Таким образом, по картам положения угла электрического вектора можно определять направления магнитного поля в диске, т. е. восстанавливать топологию магнитного поля.

На рис. 5 и 6 показаны зависимости абсолютной величины параметра $|\beta_2|$ от величины магнитного заряда при различных углах наклона наблюдателя к оси вращения черной дыры или кротовой норы для случаев радиального (рис. 5) и тороидального (рис. 6) магнитных полей в диске. Черная сплошная кривая соответствует случаю, когда наблюдатель расположен под углом $i = 17^\circ$ к оси вращения черной дыры или кротовой норы, синяя штрихпунктирная кривая — случаю, когда $i = 45^\circ$, а зеленая штриховая кривая — случаю, когда $i = 80^\circ$. Красная вертикальная линия определяет границу между черной дырой (слева) и кротовой норой (справа). На рис. 5 и 6 видно, что β_2 остается постоянной величиной для черных дыр и меняется скачкообразно на границе между черной дырой и кротовой норой. Для радиального магнитного поля в диске абсолютная величина $|\beta_2|$ для черной дыры будет меньше, чем для кротовой норы. Для тороидального распределения магнитного поля в диске ситуация зависит от наклона наблюдателя к оси вращения черной дыры (кротовой норы). Для наклона $i = 17^\circ$ и $i = 45^\circ$ абсолютная величина $|\beta_2|$ для черной дыры будет меньше, чем для кротовой норы, а для наклона $i = 80^\circ$ — ситуация обратная. Зная угол наклона наблюдателя к оси вращения источника (черной дыры или кротовой норы), распределение магнитного поля в диске и измеряя абсолютную величину $|\beta_2|$ линейной поляризации, можно сделать вывод о том, является ли источник черной дырой или кротовой норой.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе численно исследовались поляризационные свойства черных дыр и кротовых нор на примере метрики Лами. Данная метрика с хорошей точностью воспроизводит метрику вращающейся черной дыры Керра при малых магнитных зарядах и вращающуюся кротовую нору в противном случае. С помощью метода обратной трассировки лучей были построены карты линейной поляризации и положения угла электрического вектора как для случая черной дыры, так и для случая кротовой норы. Ис-

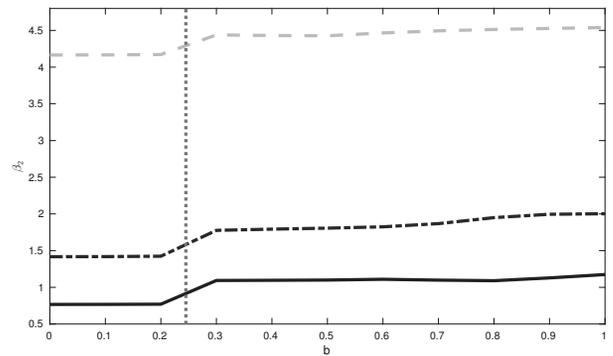


Рис. 5. Зависимости абсолютной величины параметра $|\beta_2|$ от магнитного заряда для радиального магнитного поля в диске. Сплошная черная кривая соответствует случаю, когда наблюдатель расположен под углом $i = 17^\circ$ к оси вращения черной дыры или кротовой норы, синяя штрихпунктирная кривая — случаю $i = 45^\circ$, а зеленая штриховая кривая — случаю $i = 80^\circ$. Красная вертикальная пунктирная линия соответствует границе между черной дырой (слева) и кротовой норой (справа)

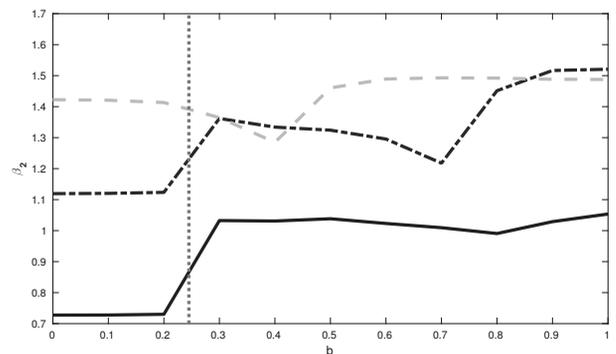


Рис. 6. Зависимости абсолютной величины параметра $|\beta_2|$ от магнитного заряда для тороидального магнитного поля в диске. Сплошная черная кривая соответствует случаю, когда наблюдатель расположен под углом $i = 17^\circ$ к оси вращения черной дыры или кротовой норы, синяя штрихпунктирная кривая — случаю $i = 45^\circ$, а зеленая штриховая — случаю $i = 80^\circ$. Красная вертикальная пунктирная линия соответствует границе между черной дырой (слева) и кротовой норой (справа)

точник излучения фотонов задавался в виде тонкого диска с тороидальным или радиальным магнитным полем. Были построены карты линейной поляризации и положения угла электрического вектора. Была построена зависимость коэффициента разложения $|\beta_2|$ линейной поляризации от величины магнитного заряда для разных значений углов наклона наблюдателя к оси вращения черной дыры (крото-

вой норы) и начального распределения магнитного поля. Был предложен критерий отличия черной дыры от кротовой норы по линейной поляризации. Измеряя линейную поляризацию, можно восстановить топологию магнитного поля, вычислить коэффициент разложения $|\beta_2|$ и, зная наклонение, можно установить, является ли источник черной дырой или кротовой норой.

Изучение альтернативных геометрий пространства-времени, отличающихся от вращающейся черной дыры Керра, оказывается особенно своевременным в связи с последними результатами группы Телескопа горизонта событий. Полученные образы центра галактик в M87* и SGR A* открыли новые тесты общей теории относительности в сильном гравитационном поле. Сходство образов черных дыр, бозонных звезд, кротовых нор и других объектов побуждает исследователей более подробно изучать альтернативные геометрии.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В формализме Ньюмена – Пенроуза вводится четыре изотропных вектора \mathbf{l} , \mathbf{n} , \mathbf{m} , \mathbf{m}^* , которые удовлетворяют следующим условиям [10]: условию ортогональности

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{l} \cdot \mathbf{m}^* = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m}^* = 0, \quad (16)$$

условию изотропности

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{m}^* \cdot \mathbf{m}^* = 0 \quad (17)$$

и условию нормировки

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{n} = 1, \quad \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}^* = -1, \quad (18)$$

где звездочка означает комплексное сопряжение. По аналогии с черной дырой Керра можно показать, что в метрике Лами следующая четверка векторов удовлетворяет приведенным выше соотношениям:

$$l^\alpha = \frac{1}{\Delta}(r^2 + a^2, \Delta, 0, a), \quad (19)$$

$$n^\alpha = \frac{1}{2\Sigma}(r^2 + a^2, -\Delta, 0, a), \quad (20)$$

$$m^\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}\bar{\rho}} \left(ia \sin \theta, 0, 1, \frac{i}{\sin \theta} \right), \quad (21)$$

$$m^{\alpha*} = \frac{1}{\sqrt{2}\rho^*} \left(-ia \sin \theta, 0, 1, \frac{-i}{\sin \theta} \right). \quad (22)$$

Для выбранной четверки изотропных векторов ненулевые λ -символы (определение λ -символов см. в [10]) определяются следующими соотношениями:

$$\lambda_{(1)(2)(2)} = - \left(\frac{r - M - rM'}{\Sigma} - \frac{r\Delta}{\Sigma^2} \right), \quad (23)$$

$$\lambda_{(1)(3)(2)} = \frac{\sqrt{2}ira \sin \theta}{\bar{\rho}\Sigma}, \quad \lambda_{(1)(3)(4)} = \frac{1}{\bar{\rho}^*}, \quad (24)$$

$$\lambda_{(1)(4)(2)} = -\frac{\sqrt{2}ira \sin \theta}{\bar{\rho}^*\Sigma}, \quad \lambda_{(1)(4)(3)} = \frac{1}{\bar{\rho}}, \quad (25)$$

$$\lambda_{(2)(1)(3)} = -\frac{\sqrt{2}a^2 \sin \theta \cos \theta}{\bar{\rho}\Sigma}, \quad (26)$$

$$\lambda_{(2)(1)(4)} = -\frac{\sqrt{2}a^2 \sin \theta \cos \theta}{\bar{\rho}^*\Sigma}, \quad (27)$$

$$\lambda_{(2)(3)(4)} = -\frac{\Delta}{2\Sigma\bar{\rho}^*}, \quad \lambda_{(2)(4)(3)} = -\frac{\Delta}{2\Sigma\bar{\rho}}, \quad (28)$$

$$\lambda_{(3)(1)(4)} = -\frac{2ia \cos \theta}{\Sigma}, \quad (29)$$

$$\lambda_{(3)(2)(4)} = -\frac{ia\Delta \cos \theta}{\Sigma^2}, \quad \lambda_{(3)(3)(4)} = \frac{r \cos \theta + ia}{\sqrt{2} \sin \theta \bar{\rho}^2}, \quad (30)$$

$$\lambda_{(3)(4)(4)} = \frac{ia - r \cos \theta}{\sqrt{2} \sin \theta \bar{\rho}^{*2}}. \quad (31)$$

Спиновые коэффициенты (определение спиновых коэффициентов см. в [10]) в метрике Лами равны

$$\kappa = \sigma = \nu = \lambda = \varepsilon = 0, \quad (32)$$

$$\mu = -\frac{\Delta}{2\Sigma\bar{\rho}^*}, \quad \pi = \frac{ia \sin \theta}{\sqrt{2}\bar{\rho}^{*2}}, \quad (33)$$

$$\tau = -\frac{ia \sin \theta}{\sqrt{2}\Sigma}, \quad \rho = -\frac{1}{\bar{\rho}^*}, \quad (34)$$

$$\beta = \frac{\cos \theta}{2\sqrt{2} \sin \theta \bar{\rho}}, \quad \alpha = \pi - \beta^*, \quad (35)$$

$$\gamma = \mu + \frac{r - M - rM'}{2\Sigma}. \quad (36)$$

Можно заметить, что только спиновый коэффициент γ в метрике Лами отличается от спинового коэффициента γ в метрике Керра.

Вейлевский скаляр Ψ_2 в метрике Лами отличен от нуля и равен

$$\Psi_2 = -\frac{M}{(r - ia \cos \theta)^3} + rM' \frac{r + ia \cos \theta}{\Sigma^2}. \quad (37)$$

В случае, когда $b = 0$, данное выражение переходит в вейлевский скаляр Ψ_2 в метрике Керра.

Уравнения движения фотона в пространственно-времени метрики Лами в координатах Бойера – Линдквиста имеют такой же вид, как и в метрике Керра:

$$\begin{aligned} \Sigma p^t &= \frac{r^2 + a^2}{\Delta} (r^2 + a^2 - aL) - a^2 \sin^2 \theta + aL, \\ \Sigma p^r &= \sqrt{(r^2 + a^2 - aL)^2 - \Delta(Q + (a - L)^2)}, \\ \Sigma p^\theta &= \sqrt{Q + a^2 \cos^2 \theta - L^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta}}, \\ \Sigma p^\phi &= \frac{a}{\Delta} (r^2 + a^2 - aL) + \frac{L}{\sin^2 \theta} - a. \end{aligned} \quad (38)$$

Напомним, что в величину Δ входит параметр (2).

Физические величины задаются с помощью введения ортонормированной тетрады. Зададим ортонормированную тетраду вида (см. [10])

$$\begin{aligned} e_{(t)}^\alpha &= (e^{-\nu}, \omega e^{-\nu}, 0, 0), \\ e_{(r)}^\alpha &= (0, e^{-\mu_2}, 0, 0), \\ e_{(\theta)}^\alpha &= (0, 0, e^{-\mu_3}, 0), \\ e_{(\phi)}^\alpha &= (0, 0, 0, e^{-\psi}), \end{aligned} \quad (39)$$

где метрические коэффициенты $e^\nu, e^\psi, e^{\mu_2}, e^{\mu_3}, \omega$ задаются в Приложении статьи [8]. Индекс в круглых скобках обозначает тетрадный индекс.

Мы связываем величины в тетрадном базисе с величинами в координатах Бойера – Линдквиста посредством соотношений

$$f^\alpha = e_{(a)}^\alpha f^{(a)}, \quad p^{(a)} = e_{(a)}^\alpha p^\alpha.$$

В развернутом виде имеем

$$f^t = e^{-\nu} f^{(t)}, \quad p^{(t)} = e^\nu p^t, \quad (40)$$

$$f^r = e^{-\mu_2} f^{(r)}, \quad p^{(r)} = e^{\mu_2} p^r, \quad (41)$$

$$f^\theta = e^{-\mu_3} f^{(\theta)}, \quad p^{(\theta)} = e^{\mu_3} p^\theta, \quad (42)$$

$$f^\phi = e^{-\psi} f^{(\phi)} + \omega e^{-\nu} f^{(t)}, \quad p^{(\phi)} = e^\psi p^\phi - \omega e^\nu p^t. \quad (43)$$

4-вектор поляризации выражается через магнитное поле в тетрадном базисе посредством формул

$$f^{(t)} = 0, \quad (44)$$

$$f^{(r)} \propto p^{(\phi)} B^{(\theta)} - p^{(\theta)} B^{(\phi)}, \quad (45)$$

$$f^{(\theta)} \propto p^{(r)} B^{(\phi)} - p^{(\phi)} B^{(r)}, \quad (46)$$

$$f^{(\phi)} \propto p^{(\theta)} B^{(r)} - p^{(r)} B^{(\theta)}. \quad (47)$$

Радиальное поле соответствует случаю

$$B^{(r)} = 1, \quad B^{(\theta)} = B^{(\phi)} = 0,$$

тороидальное поле — случаю

$$B^{(\phi)} = 1, \quad B^{(r)} = B^{(\theta)} = 0.$$

Без потери общности мы положили, что $f^{(t)} = 0$. Задавая магнитное поле, можно определить 4-вектор поляризации в источнике излучения $f^{(a)}$ и с помощью постоянных Уокера – Пенроуза найти поляризацию в точке наблюдения. На бесконечности $r \rightarrow \infty$ значения 4-импульса фотона равны

$$p^t \rightarrow 1, \quad p^r \rightarrow 1, \quad p^\phi \rightarrow \frac{\lambda}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad (48)$$

$$p^\theta \rightarrow \frac{\sqrt{\eta + a^2 \cos^2 \theta - \lambda^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta}}}{r^2}, \quad (49)$$

а 4-векторы поляризации выражаются через постоянные Уокера – Пенроуза следующим образом:

$$\sin \theta_0 f^\phi = -\frac{1}{r} \frac{K_1 D_1 + K_2 D_2}{\eta + (a - \lambda)^2}, \quad (50)$$

$$f^\theta = \frac{1}{r} \frac{K_1 D_2 - K_2 D_1}{\eta + (a - \lambda)^2}, \quad (51)$$

где

$$D_1 = \sqrt{\eta + a^2 \cos^2 \theta_0 - \lambda^2 \frac{\cos^2 \theta_0}{\sin^2 \theta_0}}, \quad (52)$$

$$D_2 = \frac{\lambda}{\sin \theta_0} - a \sin \theta_0.$$

Электрическое поле выражается через 4-векторы поляризации следующим образом:

$$E^\phi = -r \sin \theta_0 f^\phi, \quad E^\theta = -r f^\theta. \quad (53)$$

Параметры Стокса линейной поляризации определяются как

$$Q = E^{\phi^2} - E^{\theta^2}, \quad U = -2E^\phi E^\theta. \quad (54)$$

Чтобы вычислить коэффициент разложения β_m , в интеграле

$$\beta_m = \int_0^{\rho_{max}} \int_0^{2\pi} P(\rho, \phi) e^{-im\phi} \rho d\rho d\phi \quad (55)$$

сделаем замену переменных от полярных координат к декартовым:

$$x = \rho \cos \phi, \quad y = \rho \sin \phi,$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2, \quad \text{tg } \phi = \frac{y}{x}.$$

Якобиан преобразования равен

$$J = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}.$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} \beta_m &= \int_{-10}^{10} \int_{-10}^{10} P(x, y) e^{-im \operatorname{arctg} \frac{y}{x}} dx dy = \\ &= \int_{-10}^{10} \int_{-10}^{10} \left[Q \cos m\phi + U \sin m\phi + \right. \\ &\quad \left. + i(U \cos m\phi - Q \sin m\phi) \right] dx dy, \end{aligned} \quad (56)$$

где пределы интегрирования определяются размерами карт поляризации (см. рис. 1–4). Коэффициент β_2 равен

$$\begin{aligned} \beta_2 &= \int_{-10}^{10} \int_{-10}^{10} \left[Q \cos 2\phi + U \sin 2\phi + \right. \\ &\quad \left. + i(U \cos 2\phi - Q \sin 2\phi) \right] dx dy, \end{aligned} \quad (57)$$

откуда легко получить

$$\cos 2\phi = \frac{1 - \operatorname{tg}^2 \phi}{1 + \operatorname{tg}^2 \phi} = \frac{x^2 - y^2}{x^2 + y^2}, \quad (58)$$

$$\sin 2\phi = \frac{2 \operatorname{tg} \phi}{1 + \operatorname{tg}^2 \phi} = \frac{2xy}{x^2 + y^2}. \quad (59)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. The Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L1 (2019).
2. The Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **930**, L12 (2022).
3. С. В. Чернов, *Астрон. ж.* **98**, 132 (2021).
4. The Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **910**, L13 (2021).
5. The Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **910**, L13 (2021).
6. F. Lamy et al., *Class. Quant. Grav.* **35**, 115009 (2018).
7. Z.-Y. Fan and X. Wang, *Phys. Rev. D* **94**, 124027 (2016).
8. С. В. Чернов, *Астрон. ж.* **100**, 693 (2023).
9. С. Т. Cunningham and J.M. Bardeen, *Astrophys. J.* **173**, L137 (1972).
10. С. Чандрасекар, *Математическая теория черных дыр*, Мир, Москва (1986).
11. D. C. M. Palumbo, G. N. Wong, and B. S. Prather, *Astrophys. J.* **894**, 156 (2020).

GENERALIZED EINSTEIN – ROSEN BRIDGE INSIDE BLACK HOLES

V. I. Dokuchaev^{*}, K. E. Prokojev^{**}*Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences
117312 Moscow, Russia*Received January 19, 2024,
revised version February 9, 2024,
Accepted for publication February 10, 2024

We generalize the notion of Einstein – Rosen bridge by defining it as a space-like connection between two universes with regions of asymptotically minkowskian space-time infinities. The corresponding symmetry and asymmetry properties of the generalized Einstein – Rosen bridge are considered at the cases of Reissner – Nordström and Kerr metrics. We elucidate the versatility of intriguing symmetry and asymmetry phenomena outside and inside black holes. For description of the test particle (planet and photon) motion it is used the Kerr – Newman metric of the rotating and electrically charged black hole. It is demonstrated the symmetry and asymmetry of the one-way Einstein – Rosen bridge inside black hole space-time toward and through the plethora of endless and infinite universes.

DOI: 10.31857/S0044451024060063

1. INTRODUCTION

In this paper, we generalize the notion of Einstein – Rosen bridge by defining it as a space-like connection between two universes with regions of asymptotically minkowskian space-time infinities. The corresponding symmetry and asymmetry properties of the generalized Einstein – Rosen bridge are considered at the cases of Reissner – Nordström and Kerr metrics. We elucidate the versatility of intriguing symmetry and asymmetry phenomena outside and inside black holes. For description of the test particle (planet and photon) motion it is used the Kerr – Newman metric of the rotating and electrically charged black hole. It is demonstrated the symmetry and asymmetry of the one-way Einstein – Rosen bridge inside black hole toward and through the plethora of endless and infinite universes.

It seems that the original idea of an infinite series of bridges between universes in the Kerr metric belongs to Boyer and Lindquist [1]. The Reissner – Nordström and Kerr one-way bridge is discussed in Chapter 6.5 of Carroll’s textbook [2] and also in Chapters 3.5 and 4.4 of Ullmann’s textbook [3]. The last book also points to the physical obstacles to the existence of such a bridge between universes, which can be associated

with various types of instabilities (including quantum ones), which are discussed for example in [4,5] and more modern attempts [6]. However, the problem still remains open. Recently symmetrical geodesic motion, bound and unbound orbits and the possibility of passing through the Reissner – Nordström and Kerr bridge are also analyzed in [7] and [8] respectively.

2. BASICS OF THE KERR – NEWMAN METRIC

The famous Kerr – Newman metric or geometry (see e. g., [9–13]), which is the exact solution of Einstein’s equations [14–20] for a rotating and electrically black hole, is

$$ds^2 = -\frac{\Delta}{\Sigma}[dt - a \sin^2 \theta d\varphi]^2 + \frac{\sin^2 \theta}{\Sigma}[(r^2 + a^2)d\varphi - a dt]^2 + \frac{\Sigma}{\Delta}dr^2 + \Sigma d\theta^2, \quad (1)$$

where (r, θ, ϕ) are spherical coordinates and t is the time of static distant observer at the asymptotically radial infinity. In this metric

$$\Delta = r^2 - 2Mr + a^2 + q^2, \quad (2)$$

$$\Sigma = r^2 + a^2 \cos^2 \theta, \quad (3)$$

M — black hole mass, q — black hole electric charge, $a = J/M$ — specific black hole angular momentum (spin). The two roots of equation $\Delta = 0$ are

$$r_{\pm} = M \pm \sqrt{M^2 - a^2 - q^2}, \quad (4)$$

* E-mail: dokuchaev@inr.ac.ru

** E-mail: d1vais@yandex.ru

the event horizon of the black hole and

$$r_- = M - \sqrt{M^2 - a^2 - q^2}, \quad (5)$$

the internal Cauchy horizon of the black hole. In this paper we consider Kerr metric with the black hole event horizon, corresponding to $a^2 + q^2 \leq M$.

For simplification of equation and presentation of Figures we will often use units $G = 1, c = 1, M = 1$, and corresponding dimensionless parameters: radius $r \Rightarrow r/M$, time $t \Rightarrow t/M$, black hole spin $a \Rightarrow a/M$ and black hole charge $q \Rightarrow q/M$.

In the Kerr–Newman metric there the following integrals of motion for test particles [10]: μ — particle mass, E — particle total energy, L — particle azimuthal angular moment and Q — the so-called Carter constant, related with the non-equatorial particle motion.

The corresponding equations of test particle motion in the Kerr–Newman metric in the differential form are [10–13]

$$\Sigma \frac{dr}{d\tau} = \sqrt{R}, \quad (6)$$

$$\Sigma \frac{d\theta}{d\tau} = \sqrt{\Theta}, \quad (7)$$

$$\Sigma \frac{d\varphi}{d\tau} = -\left(aE - \frac{L}{\sin^2\theta}\right) + \frac{a}{\Delta}P, \quad (8)$$

$$\Sigma \frac{dt}{d\tau} = -a(aE \sin^2\theta - L) + (r^2 + a^2) \frac{P}{\Delta}. \quad (9)$$

Here

$$P = E(r^2 + a^2) - aL + \epsilon qr, \quad (10)$$

τ — the proper time of a test massive particle or an affine parameter along the trajectory of a massless particle ($\mu = 0$) like photon, ϵ — the electric charge of test particle. Respectively, the effective radial potential $R(r)$ is

$$R(r) = P^2 - \Delta [\mu^2 r^2 + (L - aE)^2 + Q], \quad (11)$$

and the effective polar potential $\Theta(\theta)$ is

$$\Theta(\theta) = Q - \cos^2\theta [a^2(\mu^2 - E^2) + L^2 \sin^{-2}\theta]. \quad (12)$$

Trajectories of massive particles ($\mu \neq 0$) depend on three parameters: $\gamma = E/\mu$, $\lambda = L/\mu$ and Q/μ^2 . Meantime, trajectories of massless particles like photons (the null geodesics) depend only on two parameters: λ and Q .

The nontrivial specific feature of the rotating Kerr black hole ($a \neq 0$) is the existence of so-called *ergosphere* [12, 13, 17, 19, 20] with the outer boundary

$$r_{\text{ES}}(\theta) = 1 + \sqrt{1 - q^2 - a^2 \cos^2\theta}. \quad (13)$$

Inside the ergosphere any test object is dragged into insuperable rotation around black hole with infinite azimuthal winding by approaching the black hole event horizon. Note that the winding effect was discussed also in [8, 21].

In the following Sections we will describe the symmetry and asymmetry of test object motion in the gravitational field of the Kerr–Newman black hole. We use equations of motion in the Kerr–Newman metric (6)–(9) in our analytic and numerical calculations of test particle geodesic trajectories [22–32].

3. ONE-WAY EINSTEIN–ROSEN BRIDGE INSIDE BLACK HOLE

We start to elucidate the versatility of intriguing symmetry and asymmetry phenomena outside and inside black holes by using the Carter–Penrose diagrams (for details see, i. e., [12, 13, 17, 18]), describing in particular the global space-time structure of black holes. The evident manifestation of *symmetry* of this global structure is infinite space volumes as outside and inside the black hole event horizon. See in Fig. 1 the corresponding Carter–Penrose diagram for the Reissner–Nordström black hole, which is a special spherically *symmetric* case of Kerr–Newman black hole without rotation, i. e., $a = 0$ but $q \neq 0$. From the pure geometric point of view this diagram is both left-right and up-down symmetric. On the contrary, from the physical or space-time point view this diagram is absolutely *asymmetric* due to the inexorable upward flow of time not only at this diagram but throughout the whole universe. More precisely it means that in the General Relativity all objects are allowed to move only inside the upward directed light cones (at $\pm 45^\circ$ with respect to the upward direction. The upward directed light cone is the inexorable *asymmetry* of the world.

2D presentation of the voyage through the interiors of Reissner–Nordström black hole with interiors by using the Einstein–Rosen bridge is shown in Fig. 2. The electric charge of the black hole is $e = 0.99$. A test planet (or spaceship) with the electric charge $\epsilon = -1.5$ is periodically orbiting around black holes with orbital parameters $\gamma = 0.5$, $\lambda = 0.5$, corresponding to the maximal radius (apogee) $r_{\text{max}} = 1.65$ and minimal radius (perigee) $r_{\text{min}} = 0.29$, respectively, in dimensional units.

The periodic planet geodesic trajectories (magenta curves, both at Fig. 2 and Fig. 4), were calculated numerically by using equations of motion (6)–(9) for mas-

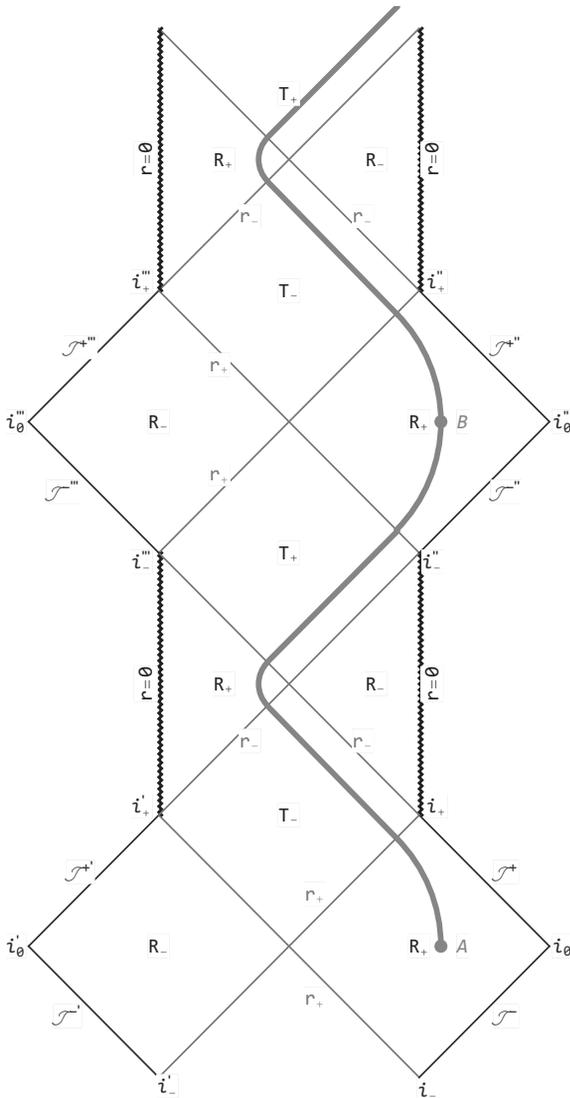


Fig. 1. Carter–Penrose diagram for the spherically symmetric Reissner–Nordström black hole with electric charge $q = 0.99$. The spaceship starts from the point A at R_+ -region toward its multi-planetary future inside the black hole. The astronauts are planning to use the Einstein–Rosen bridge (magenta curve) and intersect both the black hole event horizon r_+ and Cauchy horizon r_- at finite their proper time. After appearing near the black hole singularity at $r = 0$, the spaceship uses its powerful engines to change the direction of motion and escape the tidal destruction at small radii. In result, the voyage is happily finishing at point B (may be at the Earth-like planet) in another infinite universe. The symmetry is in possibility to repeat the complete route of this voyage starting from the point B but only in the forward direction in time toward another multi-planetary future. It is impossible to return the native Earth due to impossibility of any motion beyond the light cone. This is the motion *asymmetry* on the one-way Einstein–Rosen bridge inside black hole

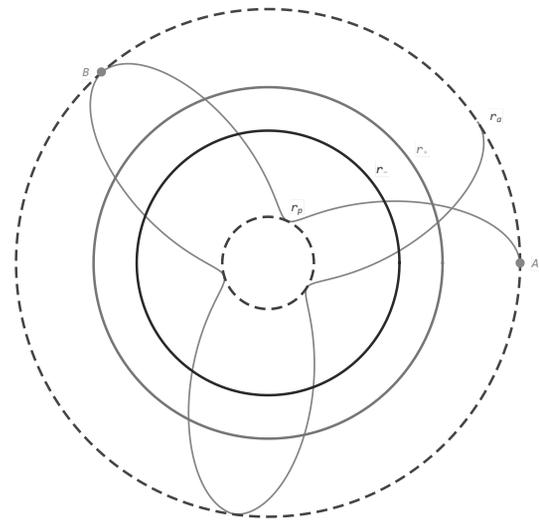


Fig. 2. 2D presentation of the voyage through the Reissner–Nordström black hole interiors by using the Einstein–Rosen bridge. This picture is geometrically absolutely *symmetric* or, in other words, it is nicely *symmetric*. At the same time, this picture is misleading and physically controversial: Indeed, the voyage is starting at apogee r_a from the position at point A , then reach the perigee r_p and return the apogee r_a at the point B for a finite proper time, demonstrating the absolute geometric *symmetry*. Meanwhile, there is a crucial hitch: this apogee r_a at the point B is not in the native universe, but in the other quite distant universe, as it is clearly viewed at the Carter–Penrose diagram in Fig. 1. The apogee r_a and perigee r_p radii are shown by dashed circles. Respectively, the event radii of event horizon r_+ and Cauchy horizon r_- are shown by solid circles. The magenta curve here and in the Fig. 4 is numerically calculated geodesic trajectory with using equations of motion (6)–(9) for massive test particles ($\mu \neq 0$)

sive test particles ($\mu \neq 0$). Note, that the periodical motion of the test planet is limited in time due to energy losses in inevitable emission of the gravitational waves.

The picture in Fig. 2 is geometrically absolutely *symmetric* or, in other words, it is completely or nicely *symmetric*. The geodesic trajectories of test planet ($\mu \neq 0$) in this Fig. 2 and in Fig. 3 (the red curves), are numerically calculated [22–32], by using the corresponding equations of motion in the Kerr–Newman metric (6)–(9).

At the same time, this picture is misleading and physically controversial: Indeed, the voyage is starting at apogee r_a from the position at point A , then reach the perigee r_p and return the apogee r_a at the point B for a finite proper time, demonstrating the abso-

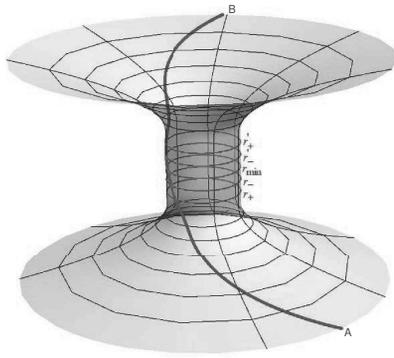


Fig. 3. Embedding diagram for the voyage through black hole interiors by using the Einstein–Rosen bridge. This bridge connects two asymptotically flat universes like wormhole tunnel, but with the only one-way motion from the initial point A to the final point B . The geometrical *symmetry* of this embedding diagram is deceptive. In fact, this embedding diagram demonstrate the *asymmetric* space-time origin of the one-way Einstein–Rosen bridge (remember about loss-cone)

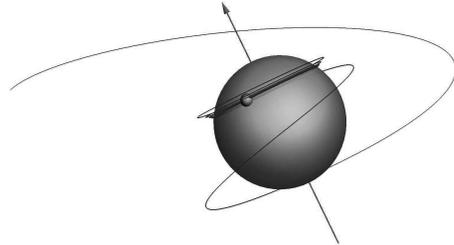


Fig. 5. Trajectory of the test planet ($\mu \neq 0$) with orbital parameters $\gamma = 0.85$, $\lambda = 1.7$ and $Q = 1$ plunging into the fast-rotating Kerr black hole with spin $a = 0.9982$. This test planet starts from the *upper* hemisphere very far from the black hole. Inside the ergosphere (13) this planet is winding up on the black hole event horizon *higher* the black hole equatorial plane. Blue curve here is the numerically calculated geodesic trajectory with using equations of motion (6)–(9) for test particles

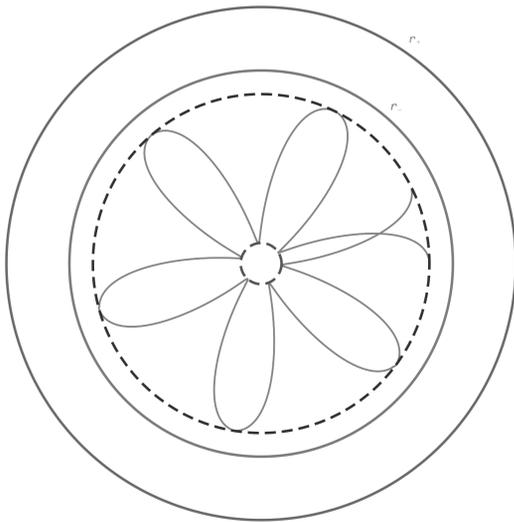


Fig. 4. Both the geometrical and physical completely *symmetric* picture of the periodic orbital motion of the test planet or spaceship around the central singularity of the Reissner–Nordström black hole inside the Cauchy horizon r_- . The *asymmetric* Reissner–Nordström bridge is only needed for penetration into this very exotic region at $0 < r < r_-$, where exist the nearly stable periodic orbits for test particles, which are very similar to the periodic orbits outside the black hole event horizon r_+ . The apogee r_a and perigee r_p radii are shown by dashed circles. Respectively, the event radii of event horizon r_+ and Cauchy horizon r_- are shown by solid circles

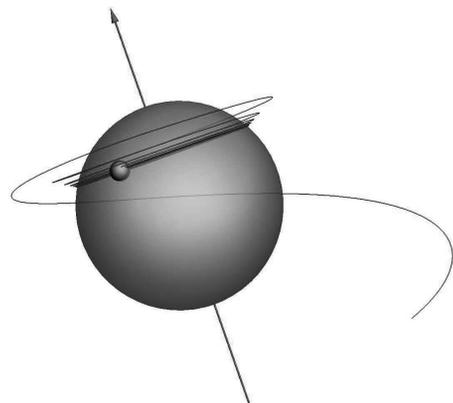


Fig. 6. Trajectory of the test planet ($\mu \neq 0$) with orbital parameters $\gamma = 0.85$, $\lambda = 1.7$ and $Q = 1$ plunging into the fast-rotating Kerr black hole with spin $a = 0.9982$. This test planet starts from the *lower* hemisphere very far from the black hole. Inside the ergosphere this planet is winding up on the black hole event horizon *higher* the black hole equatorial plane. Blue curve here is the numerically calculated geodesic trajectory with using equations of motion (6)–(9) for test particles

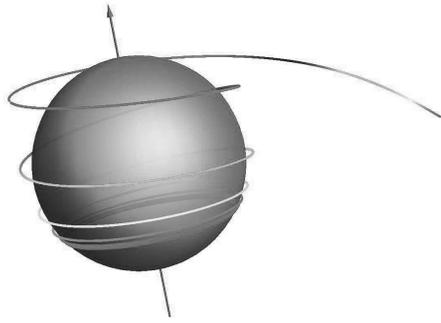


Fig. 7. Photon trajectory with orbital parameters $\lambda = 2$ and $Q = 1$. This photon is plunging into the fast-rotating Kerr black hole with $a = 0.9982$ and is winding up on the black hole event horizon below the equatorial plane. Multi-colored curve is the numerically calculated geodesic trajectory with using equations of motion (6)–(9) for massless test particles like

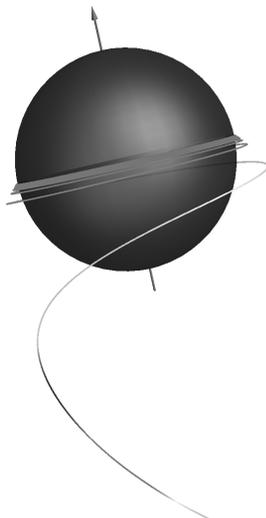


Fig. 8. Numerically calculated photon ($\mu = 0$) trajectory with orbital parameters $\lambda = -1.493$ and $Q = 12.99$, which is plunging into the fast-rotating Kerr black hole with spin $a = 0.9982$. It must be stressed that at large distances from black hole the test particle with negative azimuthal angular momentum ($\lambda = -2.811$) rotates in opposite direction with respect to the black hole. Meanwhile, by approaching the black hole (*inside the ergosphere*) test particle is forced to rotate in the same direction as black hole

lute geometric *symmetry*. Meanwhile, there is a crucial hitch: this apogee r_a at the point B is not in the native universe, but in the other quite distant universe, as it is clearly viewed at the Carter–Penrose diagram in Fig. 1. This hitch again destroys the Einstein–Rosen bridge *symmetry*.

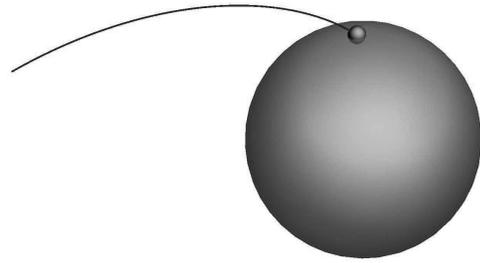


Fig. 9. A trivial but though very expressive trajectory of a test planet ($\mu \neq 0$) with parameters $\gamma = 1$, $\lambda = 1$ and $Q = 0.5$, which is plunging into the spherically *symmetric* and nonrotating Schwarzschild black hole (with both the spin $a = 0$ and electric charge $q = 0$). The starting point for this numerically calculated crazy voyage is at the radial distance $r = 6$

Figure 3 shows the embedding diagram for the voyage through black hole interiors by using the Einstein–Rosen bridge. The embedding diagram is very useful for the training of intuitive understanding of the peculiarities of the enigmatic black holes. In this embedding diagram the Einstein–Rosen bridge connects two asymptotically flat universes like wormhole tunnel [33, 34], but with the only one-way motion from the initial point A to the final point B . The geometrical *symmetry* of this embedding diagram is deceptive. In fact, this embedding diagram demonstrate the *asymmetric* space-time origin of the one-way Einstein–Rosen bridge (remember about loss-cone).

The completely *symmetric* picture of the periodic orbital motion of the test planet or spaceship around the central singularity of the Reissner–Nordström black hole inside the Cauchy horizon r_- is shown in Fig. 4. The electric charge of the black hole is $e = 0.99$ and test planet (or spaceship) with the electric charge $\varepsilon = -1.5$ is periodically orbiting around black holes with orbital parameters $\gamma = 1.7$, $\lambda = 0.1$, corresponding to the maximal radius (apogee) $r_{\max} = 0.75$ and minimal radius (perigee) $r_{\min} = 0.09$, respectively. The *asymmetric* Reissner–Nordström bridge is only needed for penetration into this very exotic region at $0 < r < r_-$, where exist the nearly stable periodic orbits for test particles [35–41], which are very similar to the periodic orbits outside the black hole event horizon r_+ .

4. SYMMETRY AND ASYMMETRY OF TEST PARTICLE TRAJECTORIES NEAR ROTATING BLACK HOLE

Figures 5–7 demonstrate both *symmetry* and *asymmetry* features of massive and massless particle trajectories plunging into rotating Kerr black hole with spin $a = 0.9982$. Magenta arrows shows the direction of the black hole rotation in accordance with the gimlet rule. The multi-colored curves at Figs. 7 and 8 are the geodesic trajectories for massless test particles like photons ($\mu = 0$) numerically calculated with using equations of motion (6)–(9). By approaching the black hole, the trajectories of all particles, both massive and massless ones, are infinitely winding up on the black hole event horizon in the direction of the black hole rotation and at the fixed latitudes. This winding up is a manifestation of *symmetry* of behavior of all trajectories, plunging into rotating black hole. At the same the direction of the black hole rotation is a corresponding manifestation of *asymmetry* of the gravitational field of the Kerr metric.

At last, for completeness of black hole *symmetric* and *asymmetric* properties, at Fig. 9 is shown the trajectory of the test planet ($\mu \neq 0$) with parameters $\gamma = 1$, $\lambda = 1$ and $Q = 0.5$. This test planet is plunging into the spherically *symmetric* and nonrotating Schwarzschild black hole (with both the spin $a = 0$ and electric charge $q = 0$), starting from the radial distance $r = 6$. It must be especially checked that the traversable (though only one-way in time and direction) Einstein–Rosen bridge is absent at all inside the Schwarzschild black hole (see for details, e. g., [12, 14]).

5. CONCLUSION AND DISCUSSION

It is demonstrated the symmetry and asymmetry of the voyage on one-way Einstein–Rosen bridge inside black hole toward the endless multiplanetary future. The apparent symmetry of both the Carter–Penrose and embedding diagrams is mainly related with a pure geometrical vision of this phenomenon. Quite the contrary, the physical (space-time) vision elucidates the absolute asymmetry of the Einstein–Rosen bridge due to existence of the light-cone limitation for possible motions.

Note, that the traversable (though only one-way in time and direction) Einstein–Rosen bridge exist only in the case of both rotating Kerr $a \neq 0$ and electrically charged Reissner–Nordström $q \neq 0$ black holes. It is absent at all inside the Schwarzschild black hole (see for details, e. g., [12, 14])

The infinite winding up of trajectories of all particles on the black hole event horizon is a manifestation of *symmetry* behavior of all trajectories, plunging into rotating black hole. At the same time, the fixed direction in space of the black hole rotation axis is a strict manifestation of the Kerr metric both *symmetry* and *asymmetry*.

Acknowledgments. We are grateful to E. O. Babichev, V. A. Berezin, Yu. N. Eroshenko, N. O. Nazarova and A. L. Smirnov for stimulating discussions. Authors also are very indebted to anonymous reviewer for suitable references and historical remarks which improve the presentation of paper.

REFERENCES

1. R. H. Boyer and R. W. Lindquist, *J. Math. Phys.* **8**, 265 (1967).
2. S. Carroll, *An Introduction to General Relativity, new international edition*, Pearson (2014), p. 257.
3. V. Ullmann, *Gravity, Black Holes and the Physics of Time-Space*; Czechoslovak Astronomic Society, CSAV, Ostrava, (Online version in English: <https://astronuclphysics.info/GravitCerneDiry.htm>) (1986).
4. Y. Giiresel, V. D. Sandberg, I. D. Novikov, and A.A. Starobinskij, *Phys. Rev. D* **19**, 413 (1979).
5. M. Simpson and R. Penrose, *Int. J. Theor. Phys.* **7**, 183 (1973).
6. R. DeMott, S. DeMott, and A. DeMott, *Class. Quant. Grav.* **39**, 195015 (2022).
7. D. Abramson, *Thai J. of Phys.* **38**, 69 (2021).
8. C. Dyson and M. van de Meent, *Class. Quant. Grav.* **40**, 195026 (2023).
9. R. P. Kerr, *Phys. Rev. Lett.* **11**, 237 (1963).
10. B. Carter, *Phys. Rev.* **174**, 1559 (1968).
11. I. D. Novikov, and K. S. Thorne, in *Black Holes*, ed. by C. DeWitt and B. S. DeWitt, Gordon and Breach, New York (1973), p. 343.
12. C. W. Misner, K. S. Thorne, and J. A. Wheeler, *Gravitation*, W. H. Freeman, San Francisco, CA, USA (1973).
13. S. Chandrasekhar, *The Mathematical Theory of Black Holes*, in *The International Series of Monograph on Physics*, Clarendon Press, Oxford (1983), Vol. 69, Chap. 7.

14. R. Penrose, *Structure of Space-Time. Battelle Rencontres 1967. Lectures in Mathematical Physics*, Chap. VII, ed. by C. M. Dewitt and J. A. Wheeler, W. A. Benjamin, Inc., New York–Amsterdam (1968), Chap. 2.
15. J. M. Bardeen, in *Black Holes*, ed. by C. DeWitt and B. S. DeWitt, Gordon and Breach Science Publishers, New York (1973), p. 215.
16. Y. Choquet-Bruhat, C. DeWitt-Morette, and M. Dillard-Bleick, *Analysis, Manifolds and Physics, Part 1, Basics*, Elsevier Science, Amsterdam (1977), Chap. V.
17. R. M. Wald, *General Relativity*, The Univ. of Chicago Press, Chicago (1984).
18. S. W. Hawking, and G. F. R. Ellis, *The Large-Scale Structure of Space-Time*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, Cambridge (2011).
19. J. M. Bardeen, W. H. Press, and S. A. Teukolsky, *Rotating Black Holes: Locally Nonrotating Frames, Energy Extraction, and Scalar Synchrotron Radiation*, *Astrophys. J.* **178**, 347 (1972).
20. J. M. Bardeen, B. Carter, and S. W. Hawking, *Commun. Math. Phys.* **31**, 161 (1973).
21. T. P. Kling, E. Grotzke, K. Roebuck, and H. Roebuck, *Gen. Rel. Grav.* **51**, 32 (2019).
22. E. O. Babichev, V. I. Dokuchaev, and Yu. N. Eroshenko, *Uspekhi Fiz. Nauk* **183** 1257 (2013) [*Phys. Usp.* **56**, 1155 (2013)].
23. V. I. Dokuchaev, *GRG* **46**, 1832 (2014).
24. V. I. Dokuchaev and Yu. N. Eroshenko, *Uspekhi Fiz. Nauk* **185** 829 (2015) [*Phys. Usp.* **58**, 772 (2015)].
25. V. I. Dokuchaev and Yu. N. Eroshenko, *Pisma JETP* **101**, 875 (2015) [*JETP Lett.* **101**, 777 (2015)].
26. V. I. Dokuchaev and N. O. Nazarova, *J. High Energy Phys. Lett.* **106**, 637 (2017).
27. V. I. Dokuchaev and N. O. Nazarova, <https://youtu.be/P6DneV0vk7U> (2017).
28. V. I. Dokuchaev and N. O. Nazarova, *ZhETF* **155**, 677 (2019) [*JETP* **128**, 578 (2019)].
29. V. I. Dokuchaev, N. O. Nazarova, and V. P. Smirnov, *GRG* **51**, 81 (2019).
30. V. I. Dokuchaev, and N. O. Nazarova, *Universe* **5**, 183 (2019).
31. V. I. Dokuchaev, *IJMPD* **28**, 1941005 (2019).
32. V. I. Dokuchaev, and N. O. Nazarova, <https://youtu.be/fps-3frL0AM> (2019).
33. J. A. Wheeler, *Geometrodynamics*, Academic Press, New York (1962).
34. M. S. Morris and K. S. Thorne, *Am. J. Phys.* **56**, 395 (1988).
35. J. Bičák, Z. Stuchlík, and V. Balek, *Bull. Astron. Inst. Czech.* **40**, 65 (1989).
36. V. Balek, J. Bičák, and Z. Stuchlík, *Bull. Astron. Inst. Czech.* **40**, 133 (1989).
37. S. Grunau and S. Kagramanova, *Phys. Rev. D* **83**, 044009 (2011).
38. M. Olivares, J. Saavedra, C. Leiva, and J. R. Vilanueva, *Mod. Phys. Lett. A* **26**, 2923 (2011).
39. E. Hackmann, V. Kagramanova, J. Kunz, and C. Lammerzahl, *Phys. Rev. D* **81**, 044020 (2010).
40. D. Pugliese, H. Quevedo, and R. Ruffini, *Phys. Rev. D* **83**, 024021, 23pp. (2011).
41. V. I. Dokuchaev, *CQG* **28**, 235015 (2008).

МЕХАНИЗМЫ ДИФФУЗИИ ЖЕЛЕЗА В α -Ti

Н. Д. Горев ^{a,b}, А. В. Бакулин ^{a*}, С. Е. Кулькова ^{a,b}

^a Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук
634055, Томск, Россия

^b Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2024 г.,
после переработки 13 февраля 2024 г.
Принята к публикации 17 февраля 2024 г.

В рамках теории переходного состояния и метода проекционных присоединенных волн проведено изучение механизмов диффузии железа в α -Ti. Рассчитаны энергии образования дефектов внедрения и замещения, а также барьеры миграции железа в α -Ti вдоль возможных путей как по междоузельному, так и вакансионному механизму. Подтверждено, что наиболее предпочтительной позицией для внедрения атома железа является краудион, энергия образования которого лишь на 0.17 эВ выше, чем образование дефекта замещения титана железом. Методом Лэндмана получены аналитические выражения для температурных коэффициентов диффузии железа в двух кристаллографических направлениях для междоузельного механизма. В целом коэффициенты диффузии железа в α -Ti и ее анизотропия согласуются с экспериментальными данными, тогда как соответствующие коэффициенты диффузии для вакансионного механизма на несколько порядков меньше. Полученные результаты позволяют заключить, что аномально быстрая диффузия железа в α -Ti обусловлена междоузельным механизмом.

DOI: 10.31857/S0044451024060075

1. ВВЕДЕНИЕ

Титан и его сплавы обладают комплексом уникальных механических свойств, что делает их перспективными материалами для применения в аэрокосмической, автомобильной, судостроительной и других отраслях промышленности. Разработка материалов на их основе с улучшенными функциональными характеристиками и механическими свойствами остается актуальной задачей на протяжении многих десятилетий [1]. Известно, что технически чистый титан обладает высокой коррозионной стойкостью, в том числе в агрессивных средах, содержащих хлор и его производные, органические соединения с кислородом и другие. Однако добавление легирующих примесей может существенно изменить его коррозионное поведение. Кроме того, одним из преимуществ титана является возможность его упрочнения кислородом, азотом, а также небольшими добавками других элементов (например, железа и палладия), чтобы получить

различные марки металла, подходящие для многочисленных технологических применений. Основное различие между марками титана заключается в содержании кислорода и железа. Железо наряду с такими элементами, как хром, марганец, кобальт, никель и другие, относится к β -эвтектическим элементам, которые стабилизируют β -фазу, понижая температуру фазового превращения β - α , равную 1156 К [2]. В отличие от β -изоморфных элементов (Mo, V и Ta) растворимость железа в α -Ti мала, около 0.05 ат.% [3]. Диффузия примесей может приводить к локальному изменению их концентрации и негативно отражаться на свойствах титана.

Многие процессы в материалах и их механические свойства связаны с атомной мобильностью [4, 5]. Знание коэффициентов диффузии и анизотропии очень важно для понимания деформационных процессов в сплавах, термической стабильности защитных покрытий, сопротивления ползучести и других характеристик. Информация о миграционных барьерах и механизмах диффузии необходима для более глубокого понимания процессов окисления и гидрирования материалов, а также влияния примесей на эти процессы [6, 7]. В этой связи изуче-

* E-mail: bakulin@ispms.tsc.ru

ние микроскопических механизмов диффузии различных элементов в титане и его сплавах представляется важным как с теоретической, так и с практической точки зрения. Установление факторов, влияющих на диффузию примесей, оказывающих негативное влияние на свойства материалов, позволяет расширить область их применения.

Несмотря на интенсивное экспериментальное изучение атомной диффузии в металлах и сплавах, теоретические расчеты диффузионных свойств остаются редкими. В большинстве работ авторы рассчитывают барьеры миграции примесей между отдельными позициями внедрения, при этом часто рассматривается лишь ограниченный набор данных позиций. Выводы о предпочтительности диффузии примесей в определенных кристаллографических направлениях делаются, как правило, на основе анализа полученных значений барьеров миграции. В то же время во внимание не принимается тот факт, что диффузия атомов может идти не только вдоль выделенных направлений, но имеются пути, когда атом смещается вдоль обоих направлений одновременно. Теория функционала электронной плотности (ФЭП) [8] совместно с теорией переходного состояния [9] позволяет понять механизмы диффузии и самодиффузии в материалах с разнообразной кристаллической структурой. С появлением алгоритмов, позволяющих рассчитывать барьеры вдоль путей с минимальной энергией в рамках ряда современных программных кодов, число публикаций по данной теме существенно возросло. Большинство работ посвящено изучению диффузии легких примесей внедрения, таких как водород или кислород (см. [10–17] и ссылки в них). Однако оценка температурного коэффициента диффузии даже с использованием упрощенных моделей требует также разработки соответствующих программ, поэтому такие расчеты остаются редкими.

В работе [18] изучалась самодиффузия металлов с ГПУ-структурой (Mg, Zn, Ti, Zr и Hf). Был проведен анализ влияния на значения миграционных барьеров ряда факторов: энергии обрезания плоских волн, сетки k -точек, размера суперъчейки и схемы структурной оптимизации. Было показано, что размер суперъчейки сильно влияет на барьеры миграции в d -металлах (Ti, Zr и Hf), но они практически не изменяются в случае Mg. Установлено, что разница в барьерах миграции в базальной плоскости и между ними уменьшается с увеличением размера суперъчейки. Оптимизация формы и объема суперъчейки также отражается на миграционных барьерах более существенно, если они рассчитыва-

ются в суперъчейке малого размера. В целом рассчитанные коэффициенты самодиффузии [18] обнаруживают хорошее согласие с экспериментом.

Следует отметить, что методами *ab initio* диффузия примесей замещения изучалась значительно реже, чем внедрения. Например, в недавней работе [19] рассчитывались коэффициенты диффузии примесей десяти элементов (Si, Ti, V, Ta, Ru, Cr, Te, Tc, Ir и Y) в Nb. Были получены миграционные барьеры для этих элементов вдоль возможных путей диффузии. Результаты данной работы хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными и ранними теоретическими данными для отдельных примесей. Отличие энергии активации от экспериментальных значений для ряда примесей составляет 0.3 – 0.6 эВ и чуть меньшее отклонение от ранних теоретических результатов получено в случае примесей Ti и Ru [20].

Зависимость температурного коэффициента от механизма атомной диффузии (вакансионного или междоузельного) также была предметом исследований в α -Ti. Считается, что быстрая диффузия атомов Fe, Co, Cr и Ni в α -Ti может быть связана с междоузельным механизмом [21] и с относительно слабой атомной связью между атомами примеси и матрицы. Коэффициент диффузии Fe и Co на 7–8 порядков выше, чем коэффициент самодиффузии титана [22]. В случае Al, Ga, Ge, Nb, Ta, Si, Sn и других элементов в качестве доминирующего был предложен вакансионный механизм [23, 24], при этом рассчитанные коэффициенты находятся в хорошем согласии с экспериментом. В работах [25, 26] было показано, что в случае Fe и Co в α -Zr образование дефекта внедрения более предпочтительно, чем дефекта замещения, тогда как в α -Ti ситуация обратная [25, 26]. Наиболее детально изучалась диффузия примесей в α -Ti в [27]. Авторы учли температурное расширение решетки и показали, что разница между энергией образования примеси замещения и внедренного атома уменьшается с температурой. Они также оценили для широкого круга примесей экспоненциальную часть коэффициента диффузии в случае междоузельного и вакансионного механизма, при этом для Fe и Co разница достигает 9–10 порядков. Однако непосредственного расчета температурного коэффициента диффузии Fe и других примесей и его сопоставления с имеющимися экспериментальными данными [28–30] не проводилось. Кроме того, авторы [27] подтвердили, что механизм с образованием комплекса примесь–вакансия не является ответственным за быструю диффузию ряда примесей в α -Ti. Таким образом, в настоящее время

многие явления, связанные с диффузией примесей, далеки от полного понимания даже в титане и его сплавах.

Целью данной работы является теоретическое изучение диффузии железа в α -Ti в рамках междуузельного и вакансионного механизмов, а также непосредственная оценка температурного коэффициента диффузии с использованием современных методик.

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ДЕТАЛИ

Расчеты атомной и электронной структуры α -Ti проводились методом проекционных присоединенных волн (PAW) [31, 32] в плоско-волновом базисе с обобщенно-градиентным приближением (GGA-PBE) [33] для обменно-корреляционного функционала. Использовалась суперъячейка $4 \times 4 \times 3$, содержащая 96 атомов. Для релаксации атомной структуры применялась полная оптимизационная схема, которая допускала изменение как атомных позиций, так и объема суперъячейки. Максимальная энергия плоских волн из базисного набора была равна 400 эВ. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием сетки k -точек $3 \times 3 \times 3$. Сходимость считалась достигнутой, если разница полных энергий двух последовательных итераций не превышала 10^{-6} эВ. Релаксация положений атомов проводилась до достижения сил на атомах порядка 10^{-4} эВ/Å. Рассчитанные параметры решетки были равны $a = 2.921$ Å и $c = 4.634$ Å и отличались от экспериментальных значений ($a = 2.951$ Å и $c = 4.684$ Å [34]) не более чем на 1%.

Энергия образования дефекта в титане рассчитывалась по следующей формуле:

$$E^f = E(\text{Fe} + \text{Ti}) - NE(\text{Ti}) - E(\text{Fe}), \quad (1)$$

где $E(\text{Fe} + \text{Ti})$ — полная энергия суперъячейки титана с атомом Fe, $E(\text{Ti})$ и $E(\text{Fe})$ — полные энергии титана и железа в основном состоянии, т.е. Ti в ГПУ-структуре и Fe в ферромагнитной ОЦК-структуре, параметр N равен 96 в случае дефекта внедрения и 95 при образовании дефекта замещения.

Барьеры миграции рассчитывались методом подталкивающих упругих связей с восходящим изображением CI-NEB [35]. Для оценки барьеров использовались пять изображений. Начальное положение этих изображений вдоль пути с минимальной энергией находилось с помощью линейной интерполяции между начальным и конечным

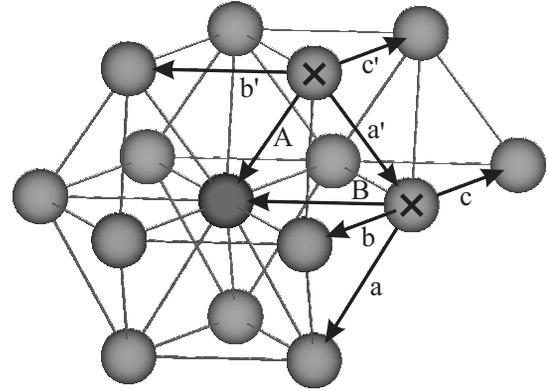


Рис. 1. Схематичное представление атомных прыжков в рамках восьмичастотной модели. Атом примеси показан красным цветом, возможные начальные позиции вакансий отмечены крестами

положениями диффундирующего атома. При релаксации всех пяти изображений каждый атом считался упруго связанным с таким же атомом в соседних изображениях. Такой подход позволяет определить траекторию с наименьшей энергией, а также седловую точку. Энергетические барьеры миграции примесного атома железа определялись как разность между полными энергиями системы в седловой и исходной точках.

Для оценки температурного коэффициента диффузии в рамках междуузельного механизма использовался метод Лэндмана [36, 37], позволяющий получать аналитические выражения для данной характеристики. Данный метод предполагает на основе фурье-образа матрицы смещения $\tilde{p}(\mathbf{k})$ и результата преобразования Лапласа матрицы плотности времени ожидания $\tilde{\psi}(u)$ построить матрицу-пропагатор $R(\mathbf{k}, u)$, через которую выражается коэффициент диффузии. Детально описание данного подхода дано в наших ранних работах [38, 39].

Для оценки коэффициента диффузии в рамках вакансионного механизма использовалась, как и в работах [23, 24, 40], восьмичастотная модель [41]. В рамках данной модели учитывается влияние примеси только на шесть перескоков, начальная позиция которых находится на первой координационной сфере примесного атома, а еще два перескока связаны с обменом вакансии и примеси местами (рис. 1). Поскольку возможны две начальные конфигурации комплекса примесь–вакансия, то для каждой необходимо рассчитать четыре энергии миграции.

Оба отмеченных выше метода для численной оценки коэффициента диффузии требуют знания скоростей или частот перескоков, которые расчи-

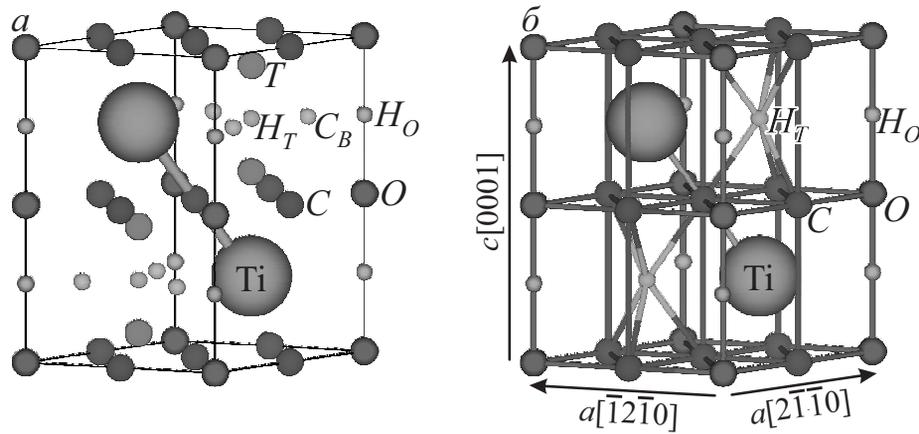


Рис. 2. Элементарная ячейка α -Ti с позициями абсорбции (а), сетка возможных диффузионных переходов атома Fe (б). Большими шарами показаны атомы титана, средними красными, синими и зелеными шарами — позиции O, C и T, маленькими розовыми, голубыми и светло-зелеными шариками — позиции H_O , C_B и H_T

тывались по приведенной в [4] формуле:

$$\Gamma = \sqrt{\frac{E^m}{2ml^2}} \exp\left(-\frac{E^m + E^f}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где E^m — энергии миграции атома дефекта, m — масса диффундирующего атома, l — длина перескока, k_B — постоянная Больцмана, T — температура.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Энергии образования дефектов

Титан в низкотемпературной α -фазе имеет гексагональную плотноупакованную структуру с пространственной группой № 194 ($P6_3/mmc$). Атомы титана занимают $2c$ -позиции по классификации Вайкоффа. В качестве позиций внедрения были рассмотрены следующие стандартные междоузельные позиции (рис. 2а): октаэдрические (O, в терминах Вайкоффа — $2a$ -позиции), тетраэдрические (T, $4f$), две гексаэдрические позиции (H_O , $2b$ и H_T , $2d$), а также два краудиона (C, $6g$ и C_B , $6h$). Напомним, что под краудионом понимается позиция для внедрения примесного атома, расположенная на связи между ближайшими атомами матрицы. В случае ГПУ-кристалла имеются две позиции краудиона: когда примесный атом располагается между атомами титана в плоскости (0001), такую позицию будем обозначать C_B ; и когда этот атом располагается между двумя ближайшими атомами титана, которые находятся в смежных базальных плоскостях (C-позиция). Кроме того, рассматривалась позиция за-

мещения атома титана железом (S , $2c$). Координаты этих позиций, а также ряд их структурных и энергетических характеристик приведены в табл. 1. При оптимизации структуры с внедренным атомом Fe оказалось, что позиция базального краудиона (C_B) не является стабильной, поскольку из нее Fe смещается в O-позицию. Расчет фононных частот показал, что для Fe в тетраэдрической и обеих гексаэдрических позициях характерно наличие мнимых частот, причем последние могут рассматриваться в качестве переходных состояний первого порядка, так как в них Fe имеет только одну мнимую частоту. Таким образом, в α -Ti для атома Fe в качестве позиций внедрения в дальнейшем будут рассматриваться лишь позиции O и C, а диффузия Fe может осуществляться по переходам, показанным на рис. 2б.

Согласно определению (1) положительное значение E^f указывает на эндотермический характер образования дефектов, поэтому меньшая энергия образования соответствует наиболее предпочтительному дефекту. Из табл. 1 следует, что краудион (C) является наиболее предпочтительной позицией внедрения, и разница в E^f с O-позицией составляет 0.26 эВ, что удовлетворительно согласуется со значением 0.16 эВ, полученным в работе [27], а чуть меньшее значение 0.14 эВ было получено в работе [26]. Чтобы объяснить предпочтительность краудиона по сравнению с октаэдрической позицией, был рассчитан механический (MC) и химический (CC) вклады в энергию образования дефекта с использованием стандартной процедуры, которая неоднократно применялась в ранних работах [42, 43] для разных энергетических характеристик. Извест-

Таблица 1. Энергия образования дефектов (E^f) Fe в α -Ti($4 \times 4 \times 3$), механический (MC) и химический (CC) вклады, относительное изменение объема суперъячейки ΔV , длина связей $d(\text{Fe-Ti})$, заселенность перекрывания орбиталей (θ)

Позиция	Координаты	E^f , эВ	MC , эВ	CC , эВ	ΔV , %	$d(\text{Fe-Ti})$, Å	$\theta(\text{Fe-Ti})$, эл.
O , $2a$	(0, 0, 0), (0, 0, 1/2)	1.02, 1.17 [27]	1.47, 1.42 [27]	-0.45, -0.25 [27]	0.75	2.31	0.59
C , $6g$	(1/2, 0, 0), (0, 1/2, 0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 1/2, 1/2),	0.76, 1.01 [27]	1.63, 1.74 [27]	-0.87, -0.74 [27]	0.74	2.08	0.80
H_O , $2b$	(0, 0, 1/4), (0, 0, 3/4)	1.19, 1.38 [27]	1.60, 1.70 [27]	-0.41, -0.33 [27]	0.80	2.10	0.80
H_T , $2d$	(1/3, 2/3, 3/4), (2/3, 1/3, 1/4)	2.08	1.82	0.26	0.94	2.22	0.67
T , $4f$	(1/3, 2/3, 0.581), (2/3, 1/3, 0.081), (2/3, 1/3, 0.419), (1/3, 2/3, 0.919)	1.35	2.18	-0.83	0.75	1.98, 2.33	0.92, 0.57
S , $2c$	(1/3, 2/3, 1/4), (2/3, 1/3, 3/4)	0.59, 0.41 [27]	0.26	0.33	-0.53	in 2.73, out 2.90	in 0.23, out 0.31

но, что эти вклады имеют противоположный знак и их конкуренция определяет предпочтительность позиций внедрения. Несмотря на то, что механический вклад в случае C -позиции превышает аналогичный для O -позиции на 0.16 эВ, величина химического вклада в первом случае значительно выше по модулю на 0.42 эВ (0.49 эВ [27]). Таким образом, более сильное межатомное взаимодействие Fe-Ti в C -позиции и определяет ее предпочтительность по сравнению с O -позицией. Внедряясь в позицию краудиона, атом Fe вызывает смещение ближайших атомов Ti на 0.65 Å в сторону от него, при этом длина связи Fe-Ti составляет 2.08 Å (табл. 1). В то же время внедрение Fe в O -позицию вызывает существенно меньшее смещение атомов титана (0.26 Å), а равновесная длина межатомной связи значительно больше (2.31 Å), чем в предыдущем случае. Как следует из табл. 1, изменение объема суперъячейки для обеих позиций практически одинаково (0.74–0.75%). Отметим, что меньшая длина связи Fe-Ti также коррелирует с большим значением заселенности перекрывания орбиталей (табл. 1), рассчитанным методом DDEC6 [44, 45]. Как показывает расчет кривых заселенности перекрывания ор-

биталей Гамильтона (СОНР) [46, 47], при взаимодействии Fe-Ti в рассмотренных позициях внедрения не индуцируется образование разрыхляющих состояний (рис. 3а), которые могут образовываться в случае примесей с более чем наполовину заполненной d -оболочкой. Отметим, что в O -позиции валентная зона Fe существенно уже, чем в C -позиции, что также может свидетельствовать об относительно слабом Fe-Ti-взаимодействии (рис. 3б).

Образование дефекта замещения титана железом требует лишь примерно 0.59 эВ, что на 0.17 эВ меньше, чем внедрение в позицию краудиона, при этом замещение титана приводит к уменьшению объема суперъячейки (табл. 1), поскольку атомный радиус Fe меньше, чем атома матрицы. Следует отметить, что разница в значениях E^f двух этих дефектов значительно ниже, чем значение 0.60 эВ, полученное в работе [27]. Такое отличие может быть связано как с разными схемами оптимизации структур с дефектами, так и с псевдопотенциалами. Например, в работе [26], в которой эта разница достигает 0.71 эВ, авторы использовали схему с фиксированным объемом. Информация об используемых параметрах решетки отсутствует в обеих ра-

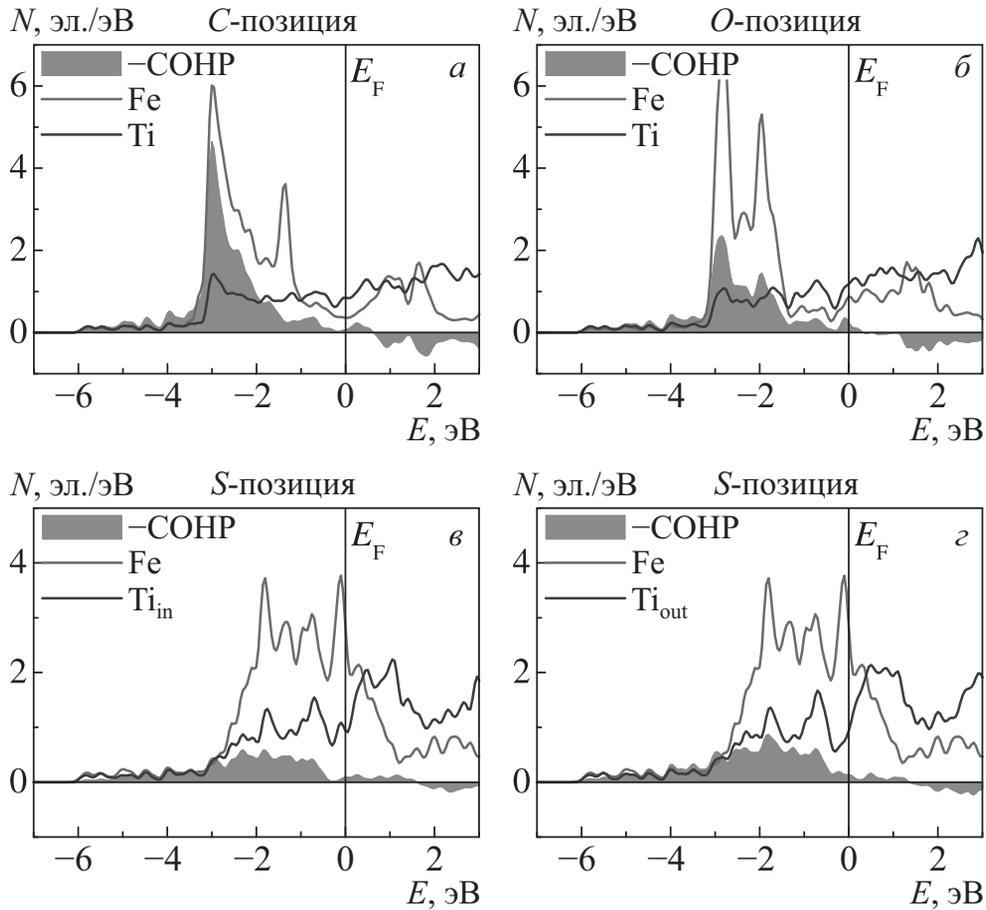


Рис. 3. Локальные плотности электронных состояний для атомов Fe (красная линия) в *C*- (*a*), *O*- (*б*) и *S*-позиции (*в*, *г*) и ближайших атомов Ti (синяя линия), а также кривые COHP для Fe–Ti-связей, показанные заливкой

ботах [26, 27]. В работе [27] для Fe и Ti использовалась электронная конфигурация, включающая *p*-электроны, тогда как *3d*- и *4s*-состояния рассматривались в настоящих расчетах, как и в работе [26].

Несмотря на то, что при замещении титана железом имеет место уменьшение длины связей Fe–Ti_{in}, ориентированных в базальной плоскости (0001), на 0.19 Å по сравнению с идеальным титаном и, напротив, увеличение длины связей между атомами в смежных плоскостях Fe–Ti_{out} на 0.04 Å, заселенность перекрывания орбиталей in-связей остается меньше, чем out-связей. Последнее согласуется с меньшей высотой кривой COHP в случае Ti_{in}, чем для Ti_{out} (рис. 3*в,г*). Отметим, что электронная структура атомов Ti_{in} и Ti_{out} различается незначительно. Разница в энергиях ΔE^f между дефектами в *O*- и *H_O*-позициях имеет значение 0.17 эВ, тогда как значения 0.12 и 0.21 эВ были получены в работах [26, 27].

3.2. Междоузельный механизм диффузии

Рассчитанные барьеры миграции атома Fe между позициями внедрения приведены в табл. 2. Видно, что прямой переход между *C*-позициями вдоль *c*-оси (рис. 2*б*) требует большей на 0.13 эВ энергии, чем в перпендикулярном направлении. Энергия миграции Fe из *O*-позиции мала и несущественно зависит от ее направления (табл. 2). В то же время энергия непрямого перескока Fe между краудинами через седловую *H_T*-позицию (*C* → *H_T* → *C*) вдоль *c*-оси составляет 1.31 эВ, что значительно больше, чем для прямого перескока (*C* → *C*) вдоль обеих осей (табл. 2). Последнее позволяет исключить данный не прямой переход из дальнейшего рассмотрения. Сопоставление результатов расчетов энергетических барьеров с имеющимися данными [27] показывает удовлетворительное согласие.

Поскольку в рамках метода Лэндмана [36, 37] в качестве позиций внедрения использовались *C* (*6g*) и *O* (*2a*) позиции, то все матрицы имели размер-

Таблица 2. Энергии миграции (E^m в эВ) Fe в α -Ti вдоль двух кристаллографических направлений

Направление	Путь	E^m , эВ
a	$C \rightarrow C$	0.42
	$C \rightarrow O$	0.41, 0.33 [27]
	$O \rightarrow C$	0.16, 0.17 [27]
c	$O \rightarrow (H_O) \rightarrow O$	0.17, 0.21 [27]
	$C \rightarrow (H_T) \rightarrow C$	1.31
	$C \rightarrow C$	0.55

ность 8×8 . Полученные выражения для коэффициентов диффузии Fe вдоль двух неэквивалентных направлений имеют следующий вид:

$$D_a = \frac{a^2 \Gamma_{OC,a} (8\Gamma_{CC,a}^2 + 6\Gamma_{CC,a} \Gamma_{CO,a} + \Gamma_{CO,a}^2)}{(\Gamma_{CO,a} + 3\Gamma_{OC,a}) (\Gamma_{CO,a} + 3\Gamma_{CC,a})} \quad (3)$$

и

$$D_c = \frac{c^2 (3\Gamma_{CC,c} \Gamma_{OC,a} + \Gamma_{CO,a} \Gamma_{OO,c})}{4(\Gamma_{CO,a} + 3\Gamma_{OC,a})}, \quad (4)$$

где a, c — параметры решетки, $\Gamma_{ij,k}$ — скорость перескока $i \rightarrow j$ вдоль оси k , которая совпадает с кристаллографическими осями.

На рис. 4 видно, что скорости Γ отличаются друг от друга на несколько порядков, в частности $\Gamma_{CO,a}/\Gamma_{OC,a} \approx 0.06$ на интервале температур 500–1150 К, поэтому выражения (3) и (4) можно упростить:

$$D_a = \frac{a^2}{3} (\Gamma_{CO,a} + 3\Gamma_{CC,a}) \quad (5)$$

и

$$D_c = \frac{c^2}{4} \Gamma_{CC,c} + 0.005c^2 \Gamma_{OO,c}. \quad (6)$$

Выражения (5), (6) позволяют оценить вклады конкретных перескоков в коэффициенты диффузии. Аппроксимируя температурную зависимость D_a и D_c согласно уравнению Аррениуса методом наименьших квадратов по точкам с шагом 50 К, получаем конечные выражения для коэффициентов диффузии в рамках междуузельного механизма:

$$D_a = 4.6 \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{1.20}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}, \quad (7)$$

$$D_c = 9.0 \cdot 10^{-8} \exp\left(-\frac{1.01}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}.$$

На рис. 5а видно, что теоретические значения температурных коэффициентов диффузии несколько превышают экспериментальные значения из ра-

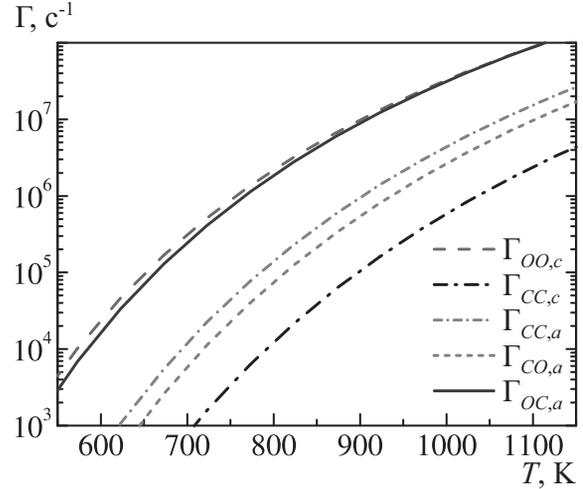


Рис. 4. Зависимость скоростей перескоков Γ от температуры

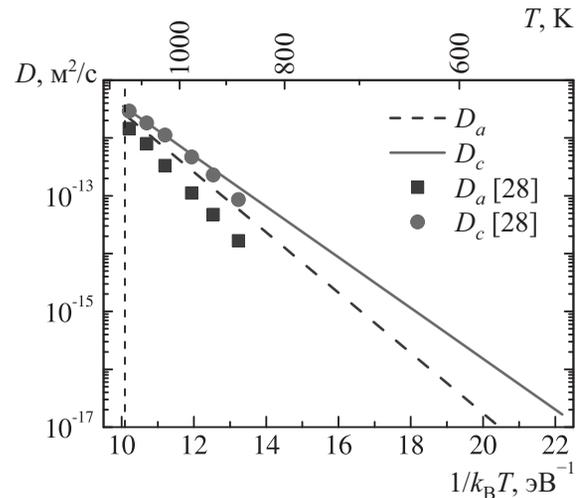


Рис. 5. Температурный коэффициент диффузии Fe в α -Ti в сопоставлении с экспериментальными данными из [28]. Полученные в настоящей работе значения показаны прямыми, экспериментальные данные — символами. Вертикальная пунктирная линия соответствует температуре фазового перехода $\alpha \leftrightarrow \beta$

боты [28], в которой коэффициенты диффузии были равны следующим выражениям:

$$D_a = 6.4 \cdot 10^{-6} \exp\left(-\frac{1.49}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}, \quad (8)$$

$$D_c = 4.7 \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{1.16}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}.$$

Из сравнения выражений (7) и (8) видно, что расчет недооценивает энергию активации примерно на 0.15–0.30 эВ, а предэкспоненциальный множитель на $(0.38\text{--}5.94) \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$. На рис. 5 видно,

Таблица 3. Энергии миграции, рассчитанные в рамках восьмичастотной модели

Перескок	A	a'	b'	c'	B	a	b	c
Настоящие результаты	0.89	0.27	0.10	1.15	0.60	0.07	0.29	0.61
Теория [27]	0.71	–	0.13	–	0.68	0.09	0.30	0.56

что анизотропия диффузии Fe в α -Ti имеет правильный характер ($D_c > D_a$), однако само отношение D_c/D_a оказывается заниженным, хотя имеет тот же порядок. Как показано в работе [48], расчет барьеров миграции с использованием обобщенного градиентного приближения в форме РВЕ приводит к их недооценке в среднем примерно на 0.1 эВ. Кроме того, примесь Fe способствует ослаблению ближайших к ней Ti–Ti-связей. Это можно видеть из изменения функции локализации электронов (ELF) [49] при замещении титана железом, приведенной на рис. 6. Локализация электронов в области аттрактора трехцентрового взаимодействия уменьшается с 0.8 до 0.6 вблизи атома Fe, что указывает на понижение ковалентного и увеличение металлического вклада в химическую связь. Ослабление связей в α -Ti также косвенно можно видеть из фазовой диаграммы системы Ti–Fe, приведенной в работе [50]. Добавление Fe в α -Ti понижает температуру плавления, что с точки зрения межатомного взаимодействия соответствует увеличению металлического вклада. При расчете барьеров миграции это может приводить к завышенным смещениям ближайших к Fe атомов титана, что, в свою очередь, понижает энергетические барьеры миграции. В целом, порядок отношения коэффициента диффузии к предэкспоненциальному множителю при $T = 1000$ К составляет 10^{-7} – 10^{-6} , тогда как экспериментальное значение равно 10^{-8} – 10^{-6} [28]. Заметим, что отличие теоретических значений коэффициента диффузии от экспериментальных на один–два порядка считается удовлетворительным, поскольку сами экспериментальные результаты имеют подобный разброс. Приблизительная оценка данного соотношения (10^{-4}) в работе [27] существенно завышена по сравнению с экспериментом.

3.3. Вакансионный механизм диффузии

Кратко обсудим результаты, полученные для вакансионного механизма диффузии железа в титане. Поскольку замещение титана железом является доминирующим дефектом, а в [27] рассчитывалась только экспоненциальная часть коэффициента диффузии при температуре, равной 1000 К, то его оцен-

ка в рамках вакансионного механизма необходима для установления наиболее предпочтительного механизма. Полученные значения энергий миграции приведены в табл. 3. Энергия образования вакансии в идеальном титане равна 2.00 эВ, что хорошо согласуется с теоретическими значениями 2.05 эВ [27] и 2.08 эВ [51], но существенно превышает экспериментальные значения 1.27–1.55 эВ [52, 53]. Заметим, что переоценка энергий образования вакансий в металлах и сплавах является известной проблемой. Учет температурного вклада в энергию образования вакансии позволяет на несколько десятых электрон-вольта уменьшить теоретические значения.

Взаимодействие с атомом железа, как отмечалось выше, ослабляет Ti–Ti-взаимодействие, что приводит к понижению энергии образования титановых вакансий. Так, энергия образования Ti-вакансии в том же атомном слое с ориентацией (0001), в котором располагается примесь железа, составляет 1.62 эВ, тогда как образование вакансии в смежном атомном слое вблизи примеси требует 1.43 эВ. Разные значения E^f предполагают, что выражения для D_a и D_c должны умножаться на разные концентрации вакансий. С энергетической точки зрения понижение энергии образования вакансии вблизи примеси железа обусловлено энергией взаимодействия вакансия–примесь, которая составляет 0.38 эВ и 0.57 эВ в случае, когда оба дефекта расположены в одном слое или в смежных слоях, что согласуется со значением 0.50 эВ [54], полученным методом Фолкнера (Faulkner).

В рамках восьмичастотной модели были получены следующие выражения для коэффициентов диффузии железа вдоль осей a и c :

$$\begin{aligned} D_a &= 1.4 \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{2.24}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}, \\ D_c &= 4.9 \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{2.32}{k_B T}\right) \text{ м}^2/\text{с}. \end{aligned} \quad (9)$$

Из формул (9) следует, что теоретические значения энергий активации в этом случае значительно превышают экспериментальные значения 1.16–1.49 эВ [28]. Последнее указывает на тот факт, что в рамках вакансионного механизма необходимы большие энергии на осуществление элементарных

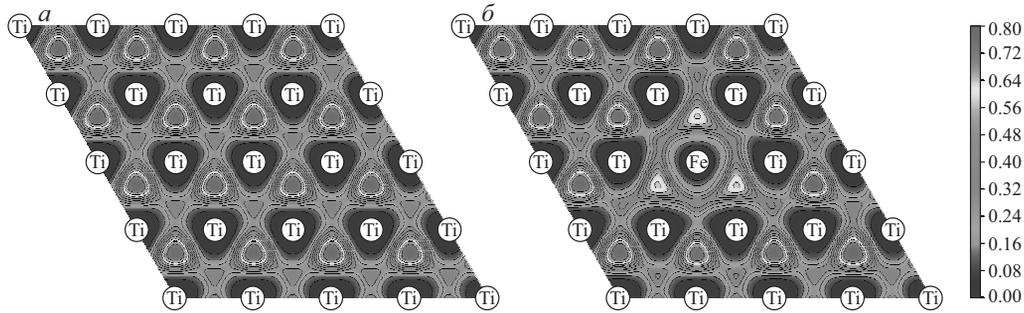


Рис. 6. Функция локализации электронов в чистом α -Ti (а) и в присутствии атома Fe (б). Показано распределение в плоскости (0001). Изолинии проведены в интервале от 0 до 0.80 с шагом 0.07

перескоков между позициями замещения. Отношение коэффициента диффузии к предэкспоненциальному множителю при 1000 К составляет 10^{-12} (значение 10^{-13} было получено в работе [27]), тогда как в рамках междоузельного механизма было получено значение 10^{-7} (в базальной плоскости) и 10^{-6} (вдоль c -оси). Таким образом, несмотря на то, что образование примеси замещения в случае Fe предпочтительнее, чем дефекта внедрения, доминантным механизмом является его диффузия по междоузлиям в α -Ti. Необходимо отметить, что оценка температурного эффекта в [27] на разницу между энергиями образования дефекта внедрения и замещения показала, что она уменьшается практически на 0.3 эВ при 1000 К. В настоящей работе разница между этими дефектами при 0 К составляет лишь 0.17 эВ, а с повышением температуры дефект внедрения может стать доминирующим. В заключение отметим также, что в расчетах концентрация железа составляла около 1 ат.%, тогда как в эксперименте она не может превышать примерно 0.06 ат.%. Увеличение числа атомов в ячейке приводит к существенным вычислительным затратам и не отражается на полученных значениях энергии миграции. Кроме того, диффундирующие атомы даже в настоящей модели не взаимодействуют друг с другом. Поэтому эффект концентрации не будет отражаться на значениях энергии активации и предэкспоненциального множителя.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом проекционных присоединенных волн изучена диффузия железа в α -Ti в рамках междоузельного и вакансионного механизмов, а также проведены оценки температурного коэффициента диффузии. Рассчитаны энергии внедрения атома Fe в различные междоузлия и установлено, что

динамически стабильными являются две позиции: октаэдрическая и краудион. Последний расположен между атомами титана в смежных базальных плоскостях. Энергетически предпочтительным является образование краудиона (0.76 эВ), тогда как образование дефекта замещения титана железом требует энергии на 0.17 эВ меньше, что согласуется с ранними теоретическими результатами. Расчет энергии миграции атома железа показал, что наименьшие барьеры соответствуют перескокам между краудионами в базальной плоскости (0.41–0.42 эВ) и между октаэдрическими позициями вдоль c -оси (0.55 эВ). Получены аналитические выражения для температурных коэффициентов диффузии железа в α -Ti в рамках междоузельного механизма. Численная оценка коэффициентов диффузии показала, что диффузия вдоль c -оси идет быстрее (энергия активации равна 1.01 эВ), чем в перпендикулярном направлении (1.20 эВ). При этом теоретические значения параметра анизотропии D_c/D_a и самих коэффициентов диффузии вдоль двух кристаллографических направлений находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом [28], согласно которому энергии активации равны 1.16 и 1.49 эВ для диффузии вдоль c -оси и в перпендикулярном направлении соответственно. В то же время диффузия железа в рамках вакансионного механизма требует большей энергии активации (2.24–2.32 эВ) и протекает на несколько порядков медленнее, чем диффузия по междоузлиям. Таким образом, проведенные исследования позволяют заключить, что для железа в α -Ti предпочтительным является междоузельный механизм диффузии.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00097). Численные расчеты проводились на суперкомпьютере СКИФ Cyberia в Томском государственном университете.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Leyens and M. Peters, *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2003).
2. M. J. Donachie, Jr. *Titanium. A Technical Guide* (2nd ed.), ASM International, Materials Park, Ohio (2000).
3. M. M. Stupel, M. Bamberger, and M. Ron, *J. Less-Common Met.* **123**, 1 (1986).
4. T. Heumann, *Diffusion in Metallen: Grundlagen, Theorie, Vorgänge in Reinetallen und Legierungen*, Springer-Verlag, Berlin (1992).
5. H. Mehrer, *Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes*, Springer, Berlin (2007).
6. Z. Li and W. Gao, in *Intermetallics Research Progress*, ed. by Y. N. Berdovsky, Nova Sci. Publ., New York (2008), p. 1.
7. D. P. Broom, *Hydrogen Storage Materials: The Characterisation of Their Storage Properties*, Springer, London (2011).
8. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
9. M. J. Gillan, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **20**, 3621 (1987).
10. D. Connetable, *Int. J. Hydrogen Energy* **44**, 32307 (2019).
11. M. G. Shelyapina, *Hydrogen* **3**, 285 (2022).
12. С. Е. Кулькова, А. В. Бакулин, Л. С. Чумакова, *Физ. Мезомех.* **25**, 51 (2022).
13. K. Klyukin, M. G. Shelyapina, and D. Fruchart, *J. Alloys Compd.* **644**, 371 (2015).
14. H. H. Wu, P. Wisesa, and D. R. Trinkle, *Phys. Rev. B* **94**, 014307 (2016).
15. А. В. Бакулин, С. С. Кульков, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **157**, 688 (2020).
16. E. Epifano and G. Hug, *Comput. Mater. Sci.* **174**, 109475 (2020).
17. D. Connetable, A. Prillieux, C. Thenot et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 175702 (2020).
18. L. J. Zhang, T. I. Spiridonova, S. E. Kulkova et al., *Comput. Mater. Sci.* **128**, 236 (2017).
19. Y. Hu, L. Suo, Q. Long et al., *Vacuum* **209**, 111739 (2023).
20. N. Zou, H. J. Lu, and X. G. Lu, *J. Alloys Compd.* **803**, 684 (2019).
21. G. M. Hood and R. J. Schultz, *Philos. Mag.* **26**, 329 (1972).
22. H. Nakajima and M. Koiwa, *ISIJ Int.* **31**, 757 (1991).
23. L. Scotti and A. Mottura, *J. Chem. Phys.* **142**, 204308 (2015).
24. W. W. Xu, S. L. Shang, B. C. Zhou et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 16870 (2016).
25. R. C. Pasianot, R. A. Perez, V. P. Ramunni et al., *J. Nucl. Mater.* **392**, 100 (2009).
26. R. C. Pasianot and R. A. Perez, *J. Nucl. Mater.* **434**, 158 (2013).
27. L. J. Zhang, Z. Y. Chen, Q. M. Hu et al., *J. Alloys Compd.* **740**, 156 (2018).
28. H. Nakajima, M. Koiwa, and S. Ono, *Scr. Metall.* **17**, 1431 (1983).
29. H. Nakajima, M. Koiwa, Y. Minonishi et al., *Trans. Jpn. Inst. Met.* **24**, 655 (1983).
30. H. Nakajima and M. Koiwa, in *Titanium, Science and Technology*, ed. by G. Lutjering, U. Zwicker, and W. Bunk, Deutsche Gesellschaft für Metallkunde e. V., Oberursel (1984), Vol. 3, p. 1759.
31. P. E. Blochl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
32. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
33. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
34. R. M. Wood, *Proc. Phys. Soc.* **80**, 783 (1962).
35. G. Henkelman, B. P. Uberuaga, and H. Jonsson, *J. Chem. Phys.* **113**, 9901 (2000).
36. U. Landman and M. F. Shlesinger, *Phys. Rev. B* **19**, 6207 (1979).

37. U. Landman and M. F. Shlesinger, *Phys. Rev. B* **19**, 6220 (1979).
38. А. В. Бакулин, Л. С. Чумакова, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **160**, 206 (2021).
39. A. V. Bakulin, L. S. Chumakova, and S. E. Kulkova, *Intermetallics* **146**, 107587 (2022).
40. S. Ganeshan, L. G. Hector Jr., and Z. K. Liu, *Acta Mater.* **59**, 3214 (2011).
41. P. B. Ghate, *Phys. Rev.* **133**, A1167 (1964).
42. A. Y. Lozovoi, A. Alavi, and M. W. Finnis, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 610 (2000).
43. S. S. Kulkov, A. V. Bakulin, and S. E. Kulkova, *Int. J. Hydrogen Energy* **43**, 43 (2018).
44. T. A. Manz and N. G. Limas, *RSC Adv.* **6**, 47771 (2016).
45. T. A. Manz, *RSC Adv.* **7**, 45552 (2017).
46. R. Dronskowski and P. E. Blochl, *J. Phys. Chem.* **97**, 8617 (1993).
47. R. Nelson, C. Ertural, J. George et al., *J. Comput. Chem.* **41**, 1931 (2020).
48. H. Wu, T. Mayeshiba, and D. Morgan, *Sci. Data* **3**, 160054 (2016).
49. B. Silvi and A. Savin, *Nature* **371**, 683 (1994).
50. G. Cacciamani, J. De Keyser, R. Ferro et al., *Intermetallics* **14**, 1312 (2006).
51. B. Medasani, M. Haranczyk, A. Canning et al., *Comput. Mater. Sci.* **101**, 96 (2015).
52. V. O. Shestopal, *Sov. Phys. Solid State* **7**, 2798 (1966).
53. E. Hashimoto, E. A. Smirnov, and T. Kino, *J. Phys. F: Met. Phys.* **14**, L215 (1984).
54. N. Chen, Z. Yu, *Acta Metall. Sin.* **30**, A112 (1994).

ОСОБЕННОСТИ ПОЛЯРИЗОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НЕОДНОРОДНОГО АНСАМБЛЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭКСИТОНОВ

*Л. В. Котова**, *В. П. Кочерешко*

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 2 февраля 2024 г.,
после переработки 12 февраля 2024 г.
Принята к публикации 15 февраля 2024

Рассмотрены особенности поляризованной люминесценции, индуцированной магнитным полем в ансамбле локализованных экситонов. Обнаружено, что 1) в неоднородном ансамбле расщепление полос фотолюминесценции в магнитном поле в правой и левой круговых поляризациях может на порядки превышать величину зеемановского расщепления отдельных экситонов в ансамбле; 2) нижняя по энергии полоса фотолюминесценции может иметь меньшую интенсивность, чем верхняя, что на первый взгляд противоречит больцмановскому распределению по энергиям; 3) знак круговой поляризации фотолюминесценции может меняться по контуру полосы излучения. Показано, что в неоднородном ансамбле все эти особенности объясняются зависимостью g -фактора экситона от энергии его локализации.

DOI: 10.31857/S0044451024060087

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффективным методом изучения спиновой ориентации экситонов и носителей в кристаллах является магнитно-циркулярная поляризация люминесценции (МЦПЛ), которая связана с температурным перераспределением носителей и экситонов между зеемановскими подуровнями в магнитном поле. Этот метод был успешно использован еще Томасом и Хопфилдом для изучения связанных экситонов [1]. С помощью этого метода была исследована тонкая структура акцепторных примесей и измерен профиль концентрации акцепторов [2] в квантовых ямах. Этот метод также оказался очень эффективным для изучения спиновой динамики носителей заряда и экситонов [3–5] в наноструктурах.

Как известно, в магнитном поле все состояния расщепляются в соответствии с проекцией магнитного момента на направление магнитного поля. При нерезонансном неполяризованном оптическом возбуждении эти состояния заселяются в соответствии с распределением Больцмана. Соотношение населенностей этих состояний определяется величиной

зеемановского расщепления и температурным фактором.

В результате фотолюминесценция (ФЛ) оказывается циркулярно поляризованной. Степень поляризации этого излучения определяется населенностью зеемановских подуровней и коэффициентом, учитывающим отсутствие полного термодинамического равновесия.

В больших магнитных полях степень поляризации перестает зависеть от магнитного поля и полностью определяется соотношением времени жизни и времени спиновой релаксации. В малых магнитных полях степень поляризации пропорциональна величине магнитного поля. Эту зависимость часто используют для определения g -фактора и отношения времен жизни и спиновой релаксации. Такая модель во многих случаях хорошо описывает экспериментальные результаты [5]. Однако в некоторых случаях экспериментальные результаты не укладываются в такую простую схему (см., например, работы [6–8]).

Как правило, в спектрах излучения проявляются не отдельные объекты, а целые ансамбли таких объектов. Такая ситуация возникает при локализации экситонов на глубоких уровнях в объемных кристаллах [9] или на флуктуациях состава в твердых

* E-mail: kotova@mail.ioffe.ru

растворах [10], на флуктуациях толщины квантовой ямы [11, 12] или площади сечения квантовой проволоки, на интерфейсах сверхрешетки [13], а также при размерном квантовании экситонов в квантовых точках [14–16] или коллоидных нанокристаллах [17–19] с учетом разброса их размеров и формы. Их линии излучения в реальных условиях почти всегда испытывают неоднородное уширение, связанное с флуктуациями резонансных энергий, концентрацией центров, пространственным положением или разбросом других параметров, определяющих энергию и ширину отдельных линий излучения.

В ансамблях локализованных состояний сигнал МЦПЛ может принимать различные формы. Иногда наблюдается «обратная заселенность» [20] зеемановских подуровней, иногда — немонотонная зависимость степени поляризации [21] от магнитного поля, а иногда — зависимость экситонного g -фактора от магнитного поля, даже с изменением знака. В некоторых случаях наблюдается гигантская величина расщепления полос излучения в двух поляризациях [21, 22], а иногда, наоборот, отсутствие зеемановского расщепления при значительной величине круговой поляризации излучения [23].

Для объяснения такого разнообразия проявлений МЦПЛ были предложены различные модели, в основном основанные на зависимости скорости захвата экситонов и носителей от распределения локализуемых центров [5, 19, 21, 24]. Однако некоторые проявления МЦПЛ не могут быть объяснены в рамках этих моделей, например, гигантское расщепление максимумов полос ФЛ в двух круговых поляризациях [22].

В квантовых точках, в отличие от, например, локализованных экситонов, на флуктуациях ширины квантовой ямы отсутствует миграция экситонов между точками. Это сильно упрощает анализ спектров МЦПЛ, так как не требуется вводить плохо известный дополнительный параметр, связанный с миграцией экситонов.

Величина расщепления уровней в магнитном поле, определяется g -фактором. Квантование экситонов и носителей в наноструктурах может приводить к изменению их g -факторов. Для электрона это изменение обусловлено спин-орбитальным взаимодействием, как впервые было показано в работе [25] и подтверждено многочисленными экспериментами [26]. Дырочный g -фактор также чувствителен к форме потенциала квантования, как было показано в [27, 28]. Для экситона [29, 30] появляется дополнительный вклад в g -фактор, обусловленный движением экситонного центра масс.

В данной работе обсуждается модель, описывающая некоторые необычные особенности спектров МЦПЛ, обусловленные неоднородной шириной линий излучения. Рассмотренная модель учитывает дисперсию g -факторов дырок, электронов и экситонов в ансамбле квантовых точек разных размеров.

Эта модель не отменяет возможной зависимости времени жизни, вероятности захвата и времени спиновой релаксации от энергии локализации экситонов. Но объясняет некоторые наблюдаемые особенности спектров излучения в условиях неоднородного уширения линий. Очевидно, что модель может быть полезна не только для описания МЦПЛ в ансамбле квантовых точек, но и для описания поляризованной ФЛ примесных центров и экситонов в условиях неоднородного уширения их полос излучения.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Как известно, в магнитном поле все состояния расщепляются в соответствии с проекцией магнитного момента на направление магнитного поля. При нерезонансном, неполяризованном оптическом возбуждении эти состояния заселяются в соответствии с распределением Больцмана. Соотношение заселенностей этих уровней определяется величиной зеемановского расщепления ΔE и температурным фактором kT . Для двухуровневой системы в равновесных условиях это отношение населенностей подуровней описывается соотношением

$$\frac{n_2}{n_1} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (1)$$

где n_1 и n_2 — концентрации экситонов на подуровнях, $\Delta E(B) = \mu g B$ — величина зеемановского расщепления между подуровнями, k — постоянная Больцмана, g — g -фактор, B — магнитное поле, μ — магнетон Бора.

Излучение из этих состояний имеет правую σ^+ или левую σ^- круговую поляризацию в зависимости от знака проекции углового момента на направление поля. Интенсивности линий излучения пропорциональны населенности уровней. Степень поляризации равна

$$P_{circ} = \frac{I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-}}{I_{\sigma^+} + I_{\sigma^-}}, \quad (2)$$

где I_{σ^+} и I_{σ^-} — интенсивности излучения в правой и левой круговых поляризациях.

Расщепление линий излучения равно величине зеемановского расщепления уровней ΔE , а отношение интенсивностей определяется фактором Больцмана. В случае, когда ширина линий излучения

больше величины зеемановского расщепления и обменного взаимодействия в экситоне степень поляризации в максимумах линий ФЛ равна

$$P_{circ} = \frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_s} \operatorname{th} \frac{\Delta E}{2kT}, \quad (3)$$

где τ_0 — время жизни, τ_s — время спиновой релаксации, $\tau_0/(\tau_0 + \tau_s)$ — множитель, учитывающий тот факт, что при конечном времени жизни полное равновесие не успевает установиться.

2.1. Поляризованная люминесценция неоднородного ансамбля

В экспериментах по поляризованной люминесценции обычно участвуют неоднородные ансамбли состояний. Это особенно относится к экситонам в ансамбле квантовых точек, в котором существует большой разброс энергий экситонных резонансов. В этом случае поляризованная люминесценция приобретает некоторые особенности.

Для примера рассмотрим ансамбль квантовых точек. Предполагаем, что линии экситонной люминесценции из каждой одной точки имеет δ -образную форму:

$$L(E, E') \propto n(E) \delta(E - E'), \quad (4)$$

где E — энергия экситонного резонанса в одной квантовой точке, $n(E)$ — населенность этой точки, $L(E)$ — форма линии ФЛ в одной точке.

В ансамбле квантовых точек могут быть точки разных размеров. Разброс точек по размерам приводит к разбросу энергий E экситонных резонансов. Мы предполагаем, что распределение резонансных энергий в ансамбле имеет гауссову форму:

$$G(E) \propto \exp\left(-\frac{E - E_0}{w}\right)^2, \quad (5)$$

где E_0 — наиболее вероятная энергия экситона в ансамбле, а w — ширина этого распределения.

Тогда форма полосы люминесценции ансамбля квантовых точек представляет собой свертку δ -образных линий люминесценции от каждой квантовой точки и распределения Гаусса:

$$I(E') = \int_{-\infty}^{\infty} G(E) L(E, E') dE. \quad (6)$$

В результате получим

$$I(E') \propto \exp\left(-\frac{E' - E_0}{w}\right)^2 n(E'). \quad (7)$$

В магнитном поле состояния расщепляются по энергии в соответствии с проекцией магнитного момента на направление магнитного поля. Энергии этих состояний в магнитном поле имеют вид

$$E' \rightarrow E' \pm \frac{1}{2} \mu B g_{eff}(E'). \quad (8)$$

Здесь мы предполагаем, что эффективный g -фактор g_{eff} зависит только от энергии экситонов экситона в квантовой точке и не зависит от формы точки. Зависимость g -фактора от формы точки будет обсуждаться в разд. 3.

Расщепленные уровни будут заселены в соответствии с распределением Больцмана. В результате для линии излучения ансамбля квантовых точек в магнитном поле получаем

$$I^{\pm}(E') \propto \exp\left\{\left(-\frac{E' - E_0}{w}\right)^2 \pm \frac{\Delta E(E')}{2kT}\right\}. \quad (9)$$

В магнитном поле полоса ФЛ расщепляется на две, $I^+(E')$ и $I^-(E')$, проявляющиеся в двух круговых поляризациях, σ^+ и σ^- , при заданном направлении магнитного поля.

Для упрощения формул положим $E_0 = 0$. Положение максимумов полос излучения определяется из решения уравнения

$$\begin{aligned} [E' \pm \mu B g_{eff}(E')] \times \\ \times \left[1 \pm \mu B \frac{dg_{eff}(E')}{dE'}\right] \mp \\ \mp \frac{w^2}{2kT} \mu B \frac{dg_{eff}(E')}{dE'} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Это уравнение может иметь несколько корней. Следовательно, форма полос будет отличаться от гауссовой и может иметь несколько максимумов.

Полосы пересекаются, когда $I^+ = I^-$, т.е. когда величина зеемановского расщепления $\Delta E(E')$ в показателе экспоненты уравнения (9) обращается в нуль. В этих точках поляризация $P_{circ}(E')$ меняет знак.

Рассмотрим три возможных случая зависимости экситонного g -фактора от энергии квантования экситона.

2.2. Величина g -фактора в ансамбле не зависит от энергии

Пусть g_{eff} не зависит от энергии E' :

$$g_{eff} = g_0.$$

Тогда

1. Максимумы полос излучения в двух круговых поляризациях находятся при энергиях $E_{max}^{\pm} = \pm \mu g_0 B / 2$.

2. Отношение амплитуд этих полос равно $e^{\frac{\mu B}{kT} g_{eff}}$.

3. Более интенсивная полоса излучения по энергии ниже менее интенсивной. Это согласуется с бoльцмановским распределением экситонов по подуровням.

4. Ширина на полувысоте обеих полос равна $2w\sqrt{\ln 2}$.

5. Полосы пересекаются в точке $E' = w^2 / 2kT$. Поскольку $w \gg kT$, точка пересечения находится далеко от максимумов полос.

6. Степень поляризации не меняет знака вдоль контура полос излучения.

Спектральная зависимость интенсивности излучения в двух круговых поляризациях представлена на рис. 1. В данном случае выбор величин E_0 не играет роли, важны только отношения величин $\mu g B / w$ и kT / w . Параметры расчета следующие:

$$w = E_0, \quad 10\mu g B = kT, \quad B = 5 \text{ Тл.}$$

Так как выбор E_0 ни на что не влияет, на рис. 1 положим $E_0 = 1.0$.

2.3. Величина g -фактора линейно зависит от энергии

Предположим, что g_{eff} зависит линейно от энергии, т. е.

$$g_{eff}(E') = g_0 + \tilde{g}E'.$$

Оценим величину

$$\mu B \frac{dg_{eff}(E')}{dE'}.$$

В области 10 Тл

$$\mu B \frac{dg_{eff}(E')}{dE'} \approx 0.053 \cdot 10\tilde{g}.$$

Считаем $\mu B \ll w$. Для немагнитных материалов разумно считать, что g_{eff} может изменяться не более чем от -10 до 10 на ширине полосы излучения. Тогда

$$\mu B \frac{dg_{eff}(E')}{dE'} \ll 1$$

и в выражении (10) этим слагаемым можно пренебречь по сравнению с единицей.

Отсюда получаем следующее.

1. Максимумы полос излучения в двух круговых поляризациях находятся при энергиях

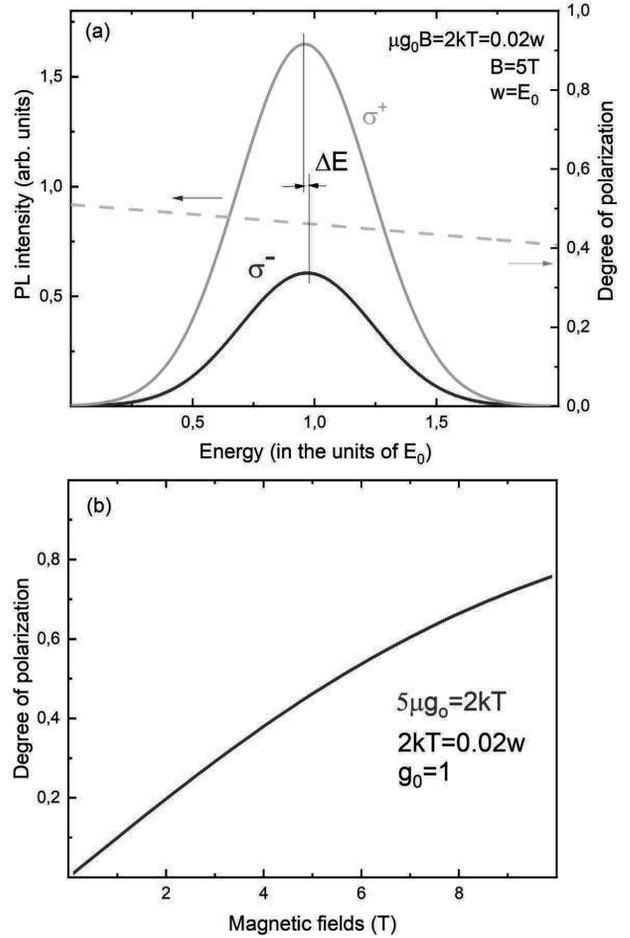


Рис. 1. *a* — Вид спектра излучения ансамбля квантовых точек в двух круговых поляризациях, σ_+ и σ_- , в некотором фиксированном магнитном поле как функция энергии квантования экситонов в точке (в единицах w в уравнении (5)) в предположении, что g -фактор не зависит от энергии квантования экситонов (сплошные линии). Параметры расчета: $w = E_0, \mu g B = kT, B = 5$ Тл. Степень круговой поляризации, индуцированной магнитным полем, как функция энергии квантования экситона (штриховая линия). *b* — Проинтегрированная по спектру зависимость степени поляризации от магнитного поля

$$E_{max}^{\pm} = \frac{\mu B \left(\mu B g_0 \tilde{g} \mp g_0 \pm \frac{w^2}{2kT} \tilde{g} \right)}{(1 \pm \mu B \tilde{g})^2}. \quad (11)$$

Заметим, что соотношение $w^2 \tilde{g} / kT$ может достигать значений $\sim 10^2 - 10^3$. Следовательно, приблизительно $E_{max}^{\pm} \approx \pm \mu B \frac{w^2}{2kT} \tilde{g}$. В этом случае расщепление полос излучения ансамбля квантовых точек может быть очень большим по сравнению с зеемановским расщеплением экситонных линий излучения в одиночной квантовой точке.

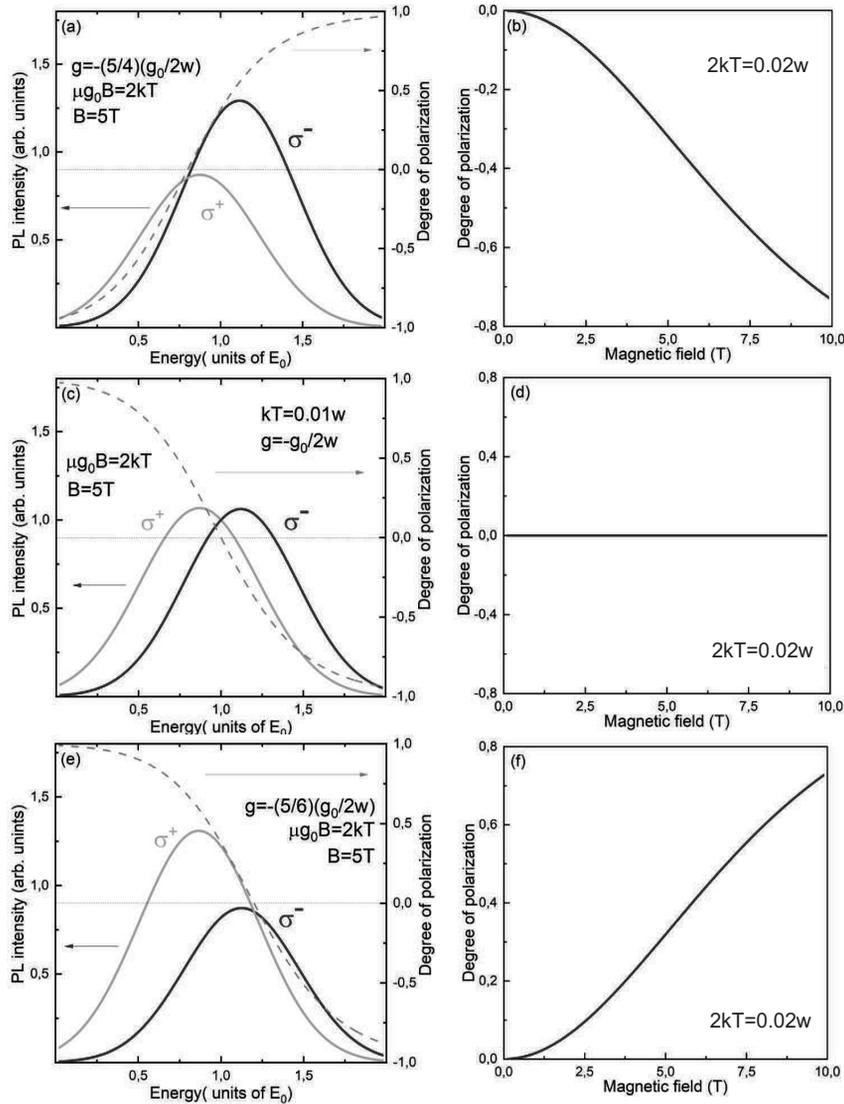


Рис. 2. Вид спектров излучения ансамбля квантовых точек в двух круговых поляризациях в фиксированном магнитном поле как функция энергии квантования экситона (в единицах w в уравнении (5)) в предположении, что g -фактор линейно зависит от энергии квантования экситона (сплошные линии). Степень круговой поляризации, индуцированной магнитным полем, как функция энергии квантования экситона (штриховые линии). Параметры расчета: $\mu g_0 B = 2kT = 0.02w$, $\tilde{g} = -\frac{5}{4} \frac{g_0}{2w}$ (a), $\tilde{g} = -\frac{g_0}{2w}$ (c), $\tilde{g} = -\frac{5}{6} \frac{g_0}{2w}$ (e). b, d, f — Соответствующие проинтегрированные по спектру зависимости степени поляризации от магнитного поля

2. Отношение амплитуд линий излучения порядка $(\mu B \tilde{g} w / kT)^2$.

3. Амплитуды этих линий составляют

$$I_{max}^{\pm} \approx \exp \left\{ -\frac{(E_{max}^{\pm})^2 \mp \frac{\mu B w^2 g_{eff}(E_{max}^{\pm})}{2kT}}{w^2} \right\}. \quad (12)$$

Видно, что отношение амплитуд полос зависит от знака g -фактора при энергии максимума полосы.

2.4. Реалистичная зависимость g -фактора от энергии

Предположим, что g_{eff} определяется по формуле

$$g_{eff}(E) = g_0 + \frac{aE'}{b(E') + R(E')}. \quad (13)$$

Здесь E' — энергия квантования экситона в локализованном потенциале, g_0, a, b и R — некоторые параметры, зависящие от E' .

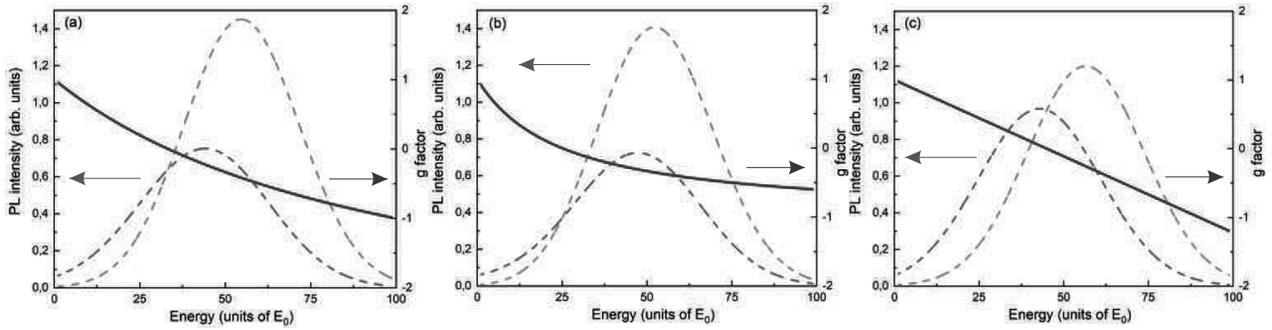


Рис. 3. Спектры излучения в двух круговых поляризациях σ_+ и σ_- (штриховые кривые). Расчетные зависимости g -фактора от энергии квантования экситона в локализирующем потенциале (13) (сплошные кривые) для различных случаев: $b(E')$ не зависит от энергии квантования, $b(E') = 0.5E_0$, $R(E') = 0.25E'$ (a); $R(E')$ не зависит от энергии квантования, $b(E') = 0.5E'$, $R(E') = 0.25E_0$ (b); $b(E')$ и $R(E')$ не зависят от энергии квантования, $b(E') = 0.45E_0$, $R(E') = 0.45E_0$ (c)

Подобная зависимость для g -фактора была получена для экситонов, локализованных в квантовых точках [28, 31, 32] и для экситонов в квантовых ямах [29, 33].

В зависимости от значений $g_0, a, b(E')$ и $R(E')$ возможны все три описанных выше случая: g -фактор меняет знак при энергии ниже максимума полосы излучения, при энергии максимума и выше максимальной энергии. Это приводит к спектрам излучения, подобным тем, что показаны на рис. 3.

Здесь возможны три случая.

1. g -фактор меняет знак при энергиях ниже максимума полосы излучения в нулевом магнитном поле. В этом случае низкоэнергетическая полоса излучения имеет меньшую интенсивность, чем высокоэнергетическая (рис. 2 a, b).

2. g -фактор меняет знак при энергии максимума полосы ФЛ в нулевом магнитном поле. Полосы излучения в обеих поляризациях имеют одинаковую амплитуду (рис. 2 c, d)

3. g -фактор меняет знак при энергии выше максимума полосы излучения в нулевом магнитном поле. Низкоэнергетическая полоса излучения более интенсивна, чем высокоэнергетическая (рис. 2 e, f).

Таким образом, получаем следующее.

1. Ширины Δ_{\pm} этих двух полос излучения равны

$$\Delta_{\pm} \approx 2w\sqrt{\ln 2}. \quad (14)$$

Менее интенсивная полоса немного шире, чем более интенсивная. Разница в ширине полос составляет менее 10 %.

2. Пересечение полос и, соответственно, обнуление степени поляризации излучения происходит при энергии, когда $g_{eff}(E') = g_0 + \tilde{g}E' = 0$.

3. Степень поляризации по контуру полосы излучения меняет знак при том значении энергии, когда $g_{eff}(E')$ меняет знак.

Спектральная зависимость интенсивности эмиссии в двух круговых поляризациях показана на рис. 2.

Очевидно, что качественно такие же зависимости получают и для любой монотонной зависимости g -фактора от энергии экситона.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Если g -фактор не меняет знака, то степень поляризации остается одного знака для всех энергий. Если g -фактор меняет знак при некоторой энергии, то степень поляризации ФЛ также меняет знак вдоль контура полосы ФЛ. Энергия, при которой поляризация меняет знак, соответствует энергии при которой g -фактор обращается в нуль.

В этом случае расщепление максимумов полос излучения описывается формулой (10) и может быть сравнимо с шириной самих полос, как если бы эффективный g -фактор экситона имел гигантскую величину $g_{eff} \sim 100$. Это выглядит очень необычно для немагнитных материалов. Этот результат определяется дисперсией g -факторов и величиной неоднородного уширения (формула (10)). В этом случае соотношение интенсивностей полос в соответствии с формулой (12) зависит от знака g -фактора.

Зависимость степени поляризации $P_{circ}(B)$ от магнитного поля также выглядит необычно. В классическом случае (3) в малых магнитных полях эта зависимость линейна по магнитному полю:

$$P_{circ}(B) \propto \mu g B / 2kT.$$

Однако в неоднородном ансамбле получаем квадратичную зависимость интегральной степени поляризации в малых полях:

$$P_{circ}(B) \propto (\mu\tilde{g}wB/2kT)^2.$$

Представленное рассмотрение проведено для равновесной ФЛ, когда термодинамическое равновесие устанавливается на зеемановских подуровнях. Отклонение от равновесного распределения учитывается в формуле (3) с помощью деполаризующего множителя

$$\frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_s}. \quad (15)$$

Таким образом, фактически мы предполагаем, что время спиновой релаксации τ_s намного меньше времени жизни τ_0 . В реальной ситуации полного равновесия может и не быть. Отношение населенностей зеемановских подуровней в неравновесном случае составляет

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) + \frac{\tau_s}{\tau_0} \operatorname{ch}\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right)}{\exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right) + \frac{\tau_s}{\tau_0} \operatorname{ch}\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right)}. \quad (16)$$

Очевидно, что уравнение (16) превращается в уравнение (1), если $\tau_s \ll \tau_0$. Однако учет неравновесности качественно не меняет спектральных зависимостей (рис. 2). В предельном случае отсутствия спиновой релаксации, $\tau_s \gg \tau_0$, различие спектров излучения в двух поляризациях исчезает.

Таким образом, основным фактором, влияющим на необычное поведение магнитоиндуцированной поляризованной люминесценции ансамбля квантовых точек, является зависимость экситонного g -фактора от дисперсии квантовых точек по размерам.

Зависимость g -фактора дырок от толщины квантовой ямы наблюдалась экспериментально в квантовых ямах на основе GaAs [34, 35] и InAs [33].

Для электрона g -фактор также зависит от энергии квантования [36, 37]. Эти зависимости будут либо усиливать, либо ослаблять друг друга. Но обычно g -фактор электрона меньше g -фактора дырки, таким образом, его вклад мал.

На практике значение g -фактора экспериментально определяется из расщепления максимумов полос излучения в магнитном поле, а населенность уровней — из отношения интенсивностей полос в двух круговых поляризациях. Как видно из представленной работы, это может дать сильно некорректные результаты.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на примере ансамбля квантовых точек исследована индуцированная магнитным полем поляризованная люминесценция локализованных экситонов. Было обнаружено следующее.

1. Расщепление максимумов полос люминесценции ансамбля на несколько порядков превышает зеемановское расщепление каждого отдельного экситона.

2. Низкоэнергетическая полоса люминесценции имеет меньшую интенсивность, чем высокоэнергетическая. Это, на первый взгляд, противоречит бальмановскому распределению экситонов по зеемановским подуровням.

3. Эффекты, описанные в пунктах 1 и 2, имеют место только в том случае, если экситонный g -фактор зависит от энергии локализации и меняет знак при некоторой энергии.

4. Если изменение знака g -фактора происходит при энергиях выше максимума полос излучения, т. е. для точек малого размера, то отношение интенсивностей полос становится соответствующим распределению Больцмана.

Результаты этой работы не ограничиваются только неоднородным ансамблем квантовых точек. Линии излучения экситонов и примесных центров в кристаллах всегда неоднородно уширены. Вопрос лишь в соотношении однородной и неоднородной ширины линий излучения.

Изменение знака g -фактора в ансамбле квантовых точек может сильно повлиять на эффекты блокировки мод, спинового эха и спиновой когерентности в ансамбле квантовых точек [38].

Благодарности. Авторы благодарят Д. С. Смирнова и Т. С. Шамирзаева за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. G. Thomas and J. J. Hopfield, *Bound Exciton Complexes*, Phys. Rev. Lett. **7**, 316 (1961).
2. V. P. Kochereshko and I. N. Uraltsev, *Polarized Magnetoluminescence Study of Confinement Effects on Shallow Acceptors in: Semiconductors and Insulators: Optical and Spectroscopic Research*, Nova Sci. Publ. Inc. (1992).
3. T. S. Shamirzaev, J. Rautert, D. R. Yakovlev et al., *Spin Dynamics and Magnetic Field Induced Polarization of Excitons in Ultrathin GaAs/AlAs*

- Quantum Wells with Indirect Band Gap and Type-II Band Alignment*, Phys. Rev. B **96**, 035302 (2017).
4. T. S. Shamirzaev, J. Rautert, D. R. Yakovlev et al., *Exciton Recombination and Spin Relaxation in Strong Magnetic Fields in Ultrathin (In, Al)As/AlAs Quantum Wells with Indirect Band Gap and Type-I Band Alignment*, Phys. Rev. B **104**, 045305 (2021).
 5. E. L. Ivchenko, *Magnetic Circular Polarization of Exciton Photoluminescence*, Phys. Sol. St. **60**, 1514 (2018).
 6. D. R. Yakovlev, A. V. Platonov, E. L. Ivchenko et al., *Hidden In-Plane Anisotropy of Interfaces in Zn(Mn)Se/BeTe Quantum Wells with a Type-II Band Alignment*, Phys. Rev. Lett. **88**, 2574011 (2002).
 7. D. Andronikov, V. Kochereshko, A. Platonov et al., *Singlet and Triplet Trion States in High Magnetic Fields: Photoluminescence and Reflectivity Spectra of Modulation-Doped CdTe/Cd_{0.7}Mg_{0.3}Te Quantum Wells*, Phys. Rev. B **72**, 165339 (2005).
 8. I. N. Uraltsev, V. P. Kochereshko, V. S. Vikhnin et al., *Polarized Luminescence Study of Shallow Acceptors in Short-Period Superlattices*, Materials Science Forum **65-66** (1990), p. 111, Proc. 4 Int. Conf. Shallow Impurities in Semiconductors, London (1990).
 9. H. P. Gislason, B. Monemar, P. J. Bean et al., *Photoluminescence Studies of the 1.911-eV Cu-Related Complex in GaP*, Phys. Rev. B **26**, 827 (1982).
 10. S. Pemogorov, A. Reznitsky, S. Verbin, and V. Lysenko, *Exciton Mobility Edge in CdS_{1-x}Se_x Solid Solutions*, Sol. St. Commun. **47**, 5 (1983).
 11. D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook et al., *Fine Structure Splitting in the Optical Spectra of Single GaAs Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3005 (1996).
 12. С. В. Гупалов, Е. Л. Ивченко, А. В. Кавокин, *Тонкая структура локализованных экситонных уровней в квантовых ямах*, ЖЭТФ **113**, 703 (1998).
 13. K. J. Moore, G. Duggan, P. Dawson et al., *Short-Period GaAs-AlAs Superlattices: Optical Properties and Electronic Structure*, Phys. Rev. B **38**, 5535 (1988).
 14. T. S. Shamirzaev, A. V. Nenashev, A. K. Gutakovskii et al., *Atomic and Energy Structure of InAs/AlAs Quantum Dots*, Phys. Rev. B **78**, 085323 (2008).
 15. J. Debus, T. S. Shamirzaev, D. Dunker et al., *Spin-Flip Raman Scattering of the Gamma-X Mixed Exciton in Indirect Band Gap (In,Al)As/AlAs Quantum Dots*, Phys. Rev. B **90**, 125431 (2014).
 16. R. Heitz, M. Grundmann, N. N. Ledentsov et al., *Multiphonon Relaxation Processes in Self-Organized InAs/GaAs Quantum Dots*, Appl. Phys. Lett. **68**, 361 (1996).
 17. Feng Liu, L. Biadala, A. V. Rodina et al., *Spin Dynamics of Negatively Charged Excitons in CdSe/CdS Colloidal Nanocrystals*, Phys. Rev. B **88**, 035302 (2013).
 18. B. Siebers, L. Biadala, D. R. Yakovlev et al., *Exciton Spin Dynamics and Photoluminescence Polarization of CdSe/CdS Dot-in-Rod Nanocrystals in High Magnetic Fields*, Phys. Rev. B **91**, 155304 (2015).
 19. G. Qiang, A. A. Golovatenko, E. V. Shornikova et al., *Polarized Emission of CdSe Nanocrystals in Magnetic Field: The Role of Phonon-Assisted Recombination of the Dark Exciton*, Nanoscale **13**, 790 (2021).
 20. V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, G. V. Mikhailov et al., *Temporal Dynamics of Exciton-Trion System*, Int. J. Nanosci. **2**, 453 (2003).
 21. G. V. Astakhov, A. A. Kiselev, V. P. Kochereshko et al., *Radiative Recombination of Electrons and Holes Localized at GaAs/AlGaAs Heterointerface under Magnetic Fields* Semicond. Sci. Technol. **14**, 110 (1999).
 22. L. Kotova, T. Shamirzaev, V. Kochereshko, *Polarized Photoluminescence and g-Factor in an Ensemble of Quantum Dots in Magnetic Fields*, arXiv:f2310.02082 (2023).
 23. Ya. V. Terent'ev, S. N. Danilov, J. Loher et al., *Magneto-Photoluminescence of InAs/InGaAs/InAlAs Quantum Well Structures*, Appl. Phys. Lett. **104**, 101111 (2014).
 24. E. S. Moskalenko, L. A. Larsson, M. Larsson et al., *Comparative Magneto-Photoluminescence Study of Ensembles and of Individual InAs Quantum Dots*, Nano Lett. **9**, 353 (2009).
 25. L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, *Theory of Optical Magneto-Absorption Effects in Semiconductors*, Phys. Rev. **114**, 90 (1959).
 26. I. A. Yugova, A. Greulich, D. R. Yakovlev et al., *Universal Behavior of the Electron g-Factor in GaAsAl_xGa_{1-x}As Quantum Wells*, Phys. Rev. B **75**, 245302 (2007).
 27. M. A. Semina, A. A. Golovatenko, and A. V. Rodina, *Influence of the Spin-Orbit Split-Off Valence Band on the Hole g-Factor in Semiconductor Nanocrystals*, Phys. Rev. B **104**, 205423 (2021).

28. M. A. Semina and R. A. Suris, *Holes Localized in Nanostructures in an External Magnetic Field: g-Factor and Mixing of States*, *Semiconductors* **49**, 797 (2015).
29. L. C. Smith, J. J. Davies, D. Wolverson et al., *Motion-Dependent Magnetic Properties of Excitons in CdTe*, *Phys. Rev. B* **78**, 085204 (2008).
30. L. C. Smith, J. J. Davies, D. Wolverson et al., *Wave-Vector Dependence of Magnetic Properties of Excitons in ZnTe*, *Phys. Rev. B* **83**, 155206 (2011).
31. Th. Wimbauer, K. Oettinger, Al. L. Efros et al., *Zeeman Splitting of the Excitonic Recombination in $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ Single Quantum Wells*, *Phys. Rev. B* **50**, 8889 (1994).
32. D. Csontosová and P. Klenovský, *Theory of Magneto-Optical Properties of Neutral and Charged Excitons in $GaAs/AlGaAs$ Quantum Dots*, *Phys. Rev. B* **102**, 125412 (2020).
33. P. S. Grigoryev, O. A. Yugov, S. A. Eliseev et al., *Inversion of Zeeman Splitting of Exciton States in $InGaAs$ Quantum Wells*, *Phys. Rev. B* **93**, 205425 (2016).
34. J. J. Davies, L. C. Smith, D. Wolverson et al., *Motion-Enhanced Magnetic Moments of Excitons in ZnSe*, *Phys. Rev. B* **81**, 085208 (2010).
35. V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, R. T. Cox et al., *Increasing of the Exciton-Polariton Zeeman Splitting Due to its Motion*, *Phys. St. Sol. (c)* **11**, 3928 (2005).
36. N. J. Traynor, R. J. Warburton, M. J. Snelling et al., *Highly Nonlinear Zeeman Splitting of Excitons in Semiconductor Quantum Wells*, *Phys. Rev. B* **55**, 15701 (1997).
37. Е. Л. Ивченко, А. А. Киселев, *Электронный g-фактор в квантовых ямах и сверхрешетках*, *ФТП* **26**, 1471 (1992).
38. A. Greilich, D. R. Yakovlev, A. Shabaev et al., *Mode Locking of Electron Spin Coherences in Singly Charged Quantum Dots*, *Science* **313**, 341 (2006).

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ Хе С ЭНЕРГИЕЙ 167 МЭВ НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ВТСП-ЛЕНТ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ

П. Н. Дегтяренко ^{a,b*}, В. А. Скуратов ^{c**}, А. Л. Васильев ^{d,e}, А. В. Овчаров ^{d***},
А. М. Петржик ^{b,f****}, В. К. Семина ^c, С. Ю. Гаврилкин ^{g†}, М. С. Новиков ^{c‡},
А. Ю. Малявина ^{h‡‡}, В. А. Амеличев ^b, А. Ю. Цветков ^g

^a Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

^b ООО «С-Инновации», 117246, Москва, Россия

^c Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Московская обл., Россия

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

^e Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^f Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук
125009, Москва, Россия

^g Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^h Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 сентября 2023 г.,
после переработки 25 января 2024 г.
Принята к публикации 26 января 2024 г.

Проведены систематические исследования ВТСП-лент второго поколения, облученных высокоэнергетичными ионами Хе с энергией 167 МэВ и флюенсами до $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Определено оптимальное значение флюенса (количества частиц, прошедших через 1 см^2 поверхности образца) для получения максимального критического тока при различных температурах и внешних магнитных полях. Увеличение внешнего магнитного поля приводит к смещению пика критического тока в сторону больших значений флюенсов во всем диапазоне температур. Приводятся результаты микроструктурных исследований методами просвечивающей/растровой электронной микроскопии и рентгеновской дифракции. Показано, что в результате облучения образуются ионные треки диаметром порядка 5–8 нм, выступающие в роли эффективных центров пиннинга. Рентгеноструктурный анализ свидетельствует о снижении остроты текстуры под воздействием облучения.

DOI: 10.31857/S0044451024060099

1. ВВЕДЕНИЕ

ВТСП-лента второго поколения представляет собой пленку высокотемпературного сверхпроводника толщиной, как правило, в единицы мкм [1]. Сверхпроводник $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (где Re — редкоземельный элемент) наносится на покрытую буферными слоями гибкую металлическую подложку. Фор-

* E-mail: degtyarenkopn@gmail.com

** E-mail: skuratov@jinr.ru

*** E-mail: ovcharov.91@gmail.com

**** E-mail: a.petrzhik@s-innovations.ru

† E-mail: gavrs@sci.lebedev.ru

‡ E-mail: msnovikov@jinr.ru

‡‡ E-mail: ayu.malyavina@gmail.com

мирование текстуры буферного слоя, необходимой для ориентированного роста пленки ВТСП, осуществляется либо за счет использования текстурированной подложки (технология RABiTS — Rolling Assisted Biaxially Textured Substrate), либо по технологии IBAD (Ion Beam Assisted Deposition). Сверху слой ВТСП покрывается защитными и шунтирующими слоями. Подавляющее большинство современных применений ВТСП-лент предполагает их работу в сильных внешних магнитных полях, которые значительно снижают сверхпроводящие возможности лент [2]. Причиной ухудшения сверхпроводящих свойств ВТСП в присутствии магнитных полей является дрейф магнитных вихрей Абрикосова, для предотвращения которого требуется создание искусственных центров пиннинга (закрепления) таких вихрей [3]. С этой целью в сверхпроводник намеренно вводятся дефекты, локально подавляющие сверхпроводимость [4]. При попадании несверхпроводящей сердцевины вихря на такой дефект происходит закрепление этого вихря. Известны различные подходы к созданию искусственных центров пиннинга, предполагающие использование дефектов разного вида [5–8]. Одним из наиболее изученных путей является введение нановключений несверхпроводящих фаз со структурой перовскита в виде так называемых наноколонн BaZrO_3 [9] или BaSnO_3 [10]. В данной же работе рассматриваются особенности и перспективы применения радиационного пиннинга с акцентом на оптимизацию флюенса под различные внешние условия по температуре и магнитному полю. В качестве образцов использовались отрезки толщиной 4 мм промышленной ВТСП-ленты второго поколения производства компании С-Инновации [11] с защитным слоем из серебра. Методика облучения подробно описана в работах [12, 13], посвященных в том числе определению оптимальной энергии облучения на лентах производства компании Superpower.

2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Образцы квадратной формы $3 \times 3 \text{ мм}^2$ вырезались из промышленной ВТСП-ленты второго поколения шириной 4 мм. Лента производства компании С-Инновации состояла из гибкой подложки (хастеллой), буферных слоев, сверхпроводящего слоя $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ толщиной порядка 2 мкм и верхнего защитного слоя из Ag толщиной порядка 0.5 мкм. Технология производства подробно изложена в [1, 11].

Образцы облучались ионами ^{132}Xe с энергией 167 МэВ. Величина флюенса варьировалась от $3 \cdot 10^{10}$ до $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Облучение потоком ионов Xe порядка $2 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ проводилось при комнатной температуре на циклотроне ИЦ-100 в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Критические токи для исходного и облученных образцов определялись из гистерезисных кривых намагничивания. Кривые снимались при температурах от 4.2 до 77 К в полях до 8 Тл на вибрационном магнитометре установки PPMS при развертке поля 15 мТл/с. Для пересчета использовалась модель Бина [14]. Данные получены для геометрии магнитного поля перпендикулярного по отношению к плоскости образца. Температура сверхпроводящего перехода определялась из кривых динамической магнитной восприимчивости, полученных на той же установке.

Рентгеноструктурный анализ проводился с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab с вращающимся медным анодом. Все измерения осуществлялись в геометрии параллельного пучка с $\text{Ge}(220)\text{x}2$ монохроматором (длина волны $\lambda_{\text{CuK}\alpha 1} = 1.541 \text{ \AA}$). Фазовый анализ, анализ ориентации пленки вне плоскости подложки осуществляли при помощи 2Theta/Omega-сканирования. Omega-сканирование (так называемые «кривые качания») измерялись для рефлексов (005) фазы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ в направлении прокатки (RD) и в поперечном направлении (TD). Анализ ширины кривых качания позволил оценить остроту текстуры ВТСП-пленки вне плоскости подложки. Определение остроты текстуры сверхпроводящей пленки в плоскости подложки осуществлялось при помощи Phi-сканирования для рефлекса (103) фазы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($2\text{Theta} = 32.5^\circ$, угол наклона образца $\text{Chi} = 45.3^\circ$). Для каждого образца осуществлялась предварительная пространственная юстировка (выведение в максимальное отражающее положение по рефлексу (005) YBCO). Съемка и последующая обработка результатов (определение параметра FWHM для кривых качания и Phi-сканов) проводилась с использованием стандартных программных комплексов SmartLab Guidance и Integral Intensity Calculation.

Микроструктурные исследования проводились на просвечивающем/растровом электронном микроскопе Tescan Osiris при ускоряющем напряжении 200 кВ. Поперечные и планарные срезы для проведения исследований были приготовлены с помощью сфокусированного ионного пучка Ga^+ на растровом электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 600i.

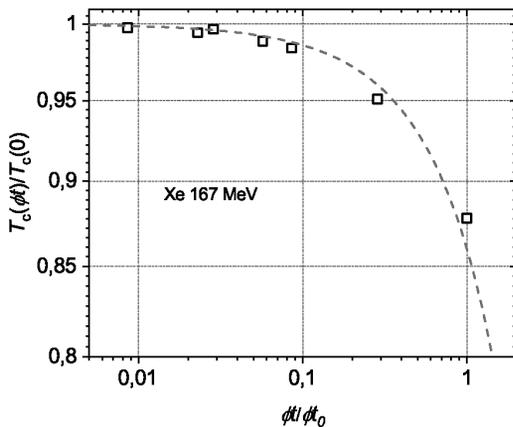


Рис. 1. Зависимость нормированной критической температуры сверхпроводящего перехода образцов ВТСП-лент второго поколения от нормированного значения флюенса ионов Хе с энергией 167 МэВ. Точки — экспериментальные данные, пунктирная кривая — зависимость $T_c \approx T_{c0}(1 - k(\phi)t)$, $k \approx 0.14 \cdot 10^{12}$, где T_{c0} — критическая температура необлученного образца

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Зависимость нормированного значения критической температуры сверхпроводящего перехода, представленная на рис. 1, показывает монотонное уменьшение T_c при увеличении флюенса. Отмечена зависимость критической температуры от дозы облучения $T_c \approx T_{c0}(1 - k(\phi)t)$, $k \approx 0.14 \cdot 10^{12}$, где T_{c0} — критическая температура необлученного образца. Падение T_c начинается при флюенсе $8 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и при флюенсе $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ снижается на 4 процента до 84.5 К (см. таблицу). Такое поведение связано с образованием ионных треков, которые являются причиной ухудшения остроты текстуры образцов. При этом создаваемые ионные треки являются эффективными центрами пиннинга вихревой структуры, что приводит к увеличению токнесущей способности образцов.

На рис. 2 а представлены экспериментальные зависимости нормированных (на необлученный образец, находящийся в условиях 77 К, 0 Тл) значений критического тока от нормированного флюенса ионов Хе при температурах 77, 65 и 20 К в поле 1 Тл. Характер зависимостей для представленных температур схожий, максимумы на кривых соответствуют оптимальному для данного поля флюенсу порядка $2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

При $T = 20$ К (см. рис. 2 б) в поле 1 Тл пик критического тока находится в области флюенса

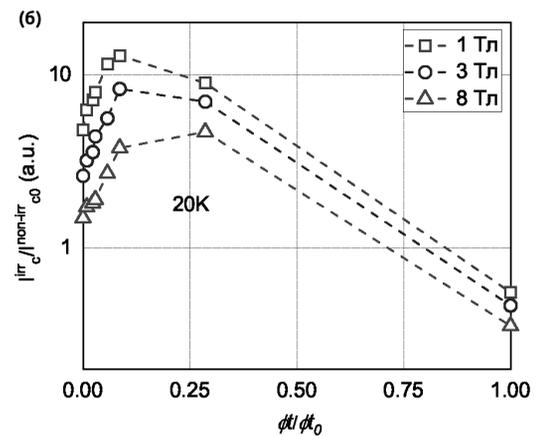
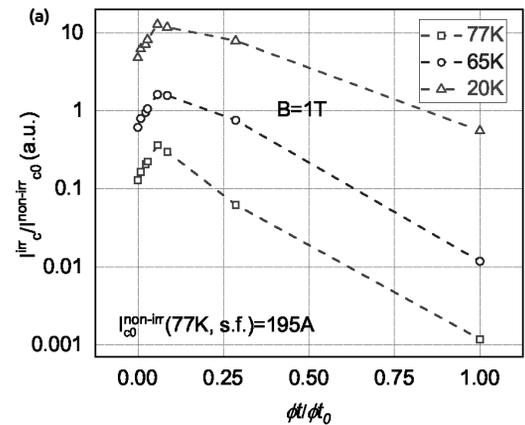


Рис. 2. Зависимости нормированного критического тока образцов ВТСП-ленты второго поколения от нормированного значения флюенса ионов Хе энергией 167 МэВ: а — в поле 1 Тл и при температурах 77, 65 К и 20 К; б — в полях 1, 3 и 8 Тл и температуре 20 К

$3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, а при повышении поля заметно смещается и при 8 Тл соответствует флюенсу $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Наблюдаемое поведение критического тока связано с увеличением концентрации ионных треков, выступающих в роли эффективных центров пиннинга. Таким образом, облучение приводит к образованию большей плотности ионных треков длиной порядка глубины ВТСП-пленки (брэгговская длина пробега таких ионов составляет несколько мкм). При этом с увеличением флюенса растет число образовавшихся ионных треков, расстояние между которыми становится сопоставимым с 2λ (λ — глубина проникновения). Именно на таком расстоянии происходит максимальное увеличение силы коллективного пиннинга, т.е. пик-эффект по критическому току. Согласно работе [15], для необлученных образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ глубина проникновения при

Таблица. Параметры необлученного и облученных ионами Хе с различным флюенсом образцов. XRD RD и XRD TD — полуширина кривой качания (005) YBCO вдоль и поперек ленты соответственно. Столбец XRD Phi соответствует рефлексу (103) YBCO при Phi-сканировании. Жирным с подчеркиванием выделены максимальные значения I_c для различных внешних условий

Флюенс, см^{-2}	I_c , А (4 мм, $B = 0$, 77 К),	I_c , А (4 мм, $B = 2$ Тл, 50 К)	I_c , А (4 мм, $B = 8$ Тл, 20 К)	T_c , К	XRD RD FWHM, град.	XRD TD FWHM, град.	XRD Phi FWHM, град.
0	195	207	291	88	1.129	1.350	2.86
$3 \cdot 10^{10}$	195	257	336	88	1.144	1.887	3.39
$8 \cdot 10^{10}$	233	368	400	87.8	1.163	2.33	3.81
$1 \cdot 10^{11}$	274	455	496	87.7	1.175	2.413	4.53
$2 \cdot 10^{11}$	270	735	734	87.4	1.227	5.346	5.03
$3 \cdot 10^{11}$	198.5	635	725	87	1.179	3.079	4.39
$5 \cdot 10^{11}$	171	644	921	86.5	1.192	4.359	5.29
$1 \cdot 10^{12}$	63	397	906	84.5	1.268	5.294	5.89

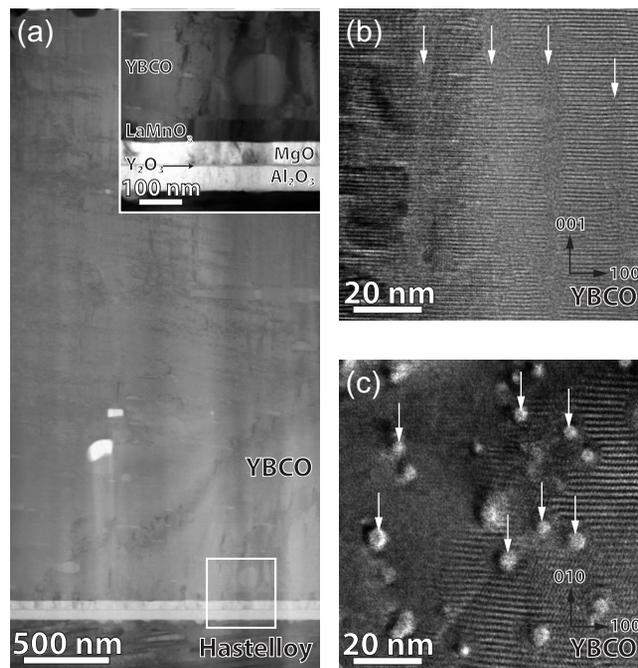


Рис. 3. Полученные с помощью просвечивающего растрового электронного микроскопа (ПРЭМ) светлопольные изображения поперечного среза ВТСП-ленты (а); на врезке — увеличенное изображение интерфейса подложка/буферные слои/ВТСП. Полученные с помощью просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) изображения поперечного (b) и планарного (c) срезов ВТСП-слоя. Белыми стрелками на изображениях указаны дефекты, образующиеся в ВТСП-матрице после воздействия ионами Хе

$T = 0$ К составляет 150 нм. По нашим данным для образца, облученного ионами Хе с флюенсом

$3 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$, глубина проникновения составляет 30 нм. Оценка проводилась из соотношения для второ-

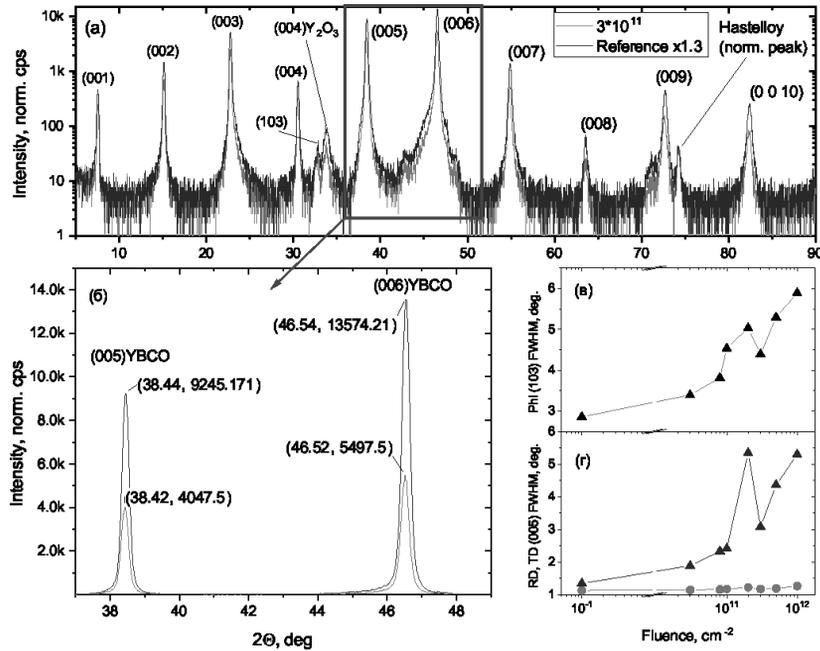


Рис. 4. *a* — Дифрактограммы, снятые в симметричном Theta/2Theta-режиме, для исходного (необлученного) и облученного ионами Хе с флюенсом $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ образцов. «Norm. peak» — это рефлекс от подложки, по которому проводилась нормировка интенсивности. *б* — Приближенная область рисунка *a*, на которой детально видно существенное изменение интенсивности рефлексов (005) и (006)YBCO до и после облучения. *в* — Средние значения FWHM YBCO рефлекса (103) при Phi-сканировании в зависимости от величины флюенса. *г* — FWHM кривой качания (005)YBCO в параллельном (RD) и перпендикулярном (TD) ленте направлениях в зависимости от величины флюенса

го критического поля ($H_{c2} = \Phi_0 / (\pi \lambda^2)$), значение которого получено из экспериментальных данных путем построения зависимости температуры сверхпроводящего перехода от внешнего магнитного поля. В образце реализуется состояние упругого межвихревого взаимодействия, которое и способствует максимальному повышению токнесущей способности. Для наглядности в таблице представлены максимальные значения критического тока I_c , полученные для трех характерных внешних условий: при $B = 0$, $T = 77 \text{ К}$ флюенс $1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ дает $I_c = 274 \text{ А}$, при $B = 2 \text{ Тл}$, $T = 50 \text{ К}$ оптимум смещается до флюенса $2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (735 А), а при $B = 8 \text{ Тл}$, $T = 20 \text{ К}$ — уже до $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (критический ток 921 А). Из таблицы видно, что при больших флюенсах критический ток I_c при 77 К в собственном поле и критическая температура T_c начинают значительно снижаться из-за нарушения структуры сверхпроводника.

На рис. 3 представлены изображения микроструктуры образца, облученного ионами Хе с флюенсом $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, с различным увеличением. На полноразмерном изображении среза образца (рис. 3а) отчетливо проявляется высокая однородность пленки без каких-либо дефектов. На увеличенном ПЭМ-изображении поперечного среза

пленки ВТСП можно заметить следы ионных треков, представляющие собой аморфные вертикальные наноклонны диаметром около 6 нм (рис. 3б). Для лучшей визуализации треков были получены ПЭМ-изображения планарного среза ВТСП-слоя, на которых отчетливо видны округлые аморфные области (рис. 3в). Стоит отметить, что наблюдается небольшой разброс диаметров треков и их частичное перекрытие.

На рис. 4 представлены дифрактограммы, снятые в симметричном режиме на дифрактометре Rigaku Smart Lab. На рис. 4а видно, что положения пиков исходного и облученных образцов (для примера показана дифрактограмма для образца, облученного ионами Хе с флюенсом $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) практически не различимы, а значит параметр кристаллической решетки c под облучением не изменяется. Однако существенно увеличиваются ширины пиков, что говорит о снижении остроты текстуры, см. приближенную область на рис. 4б. Сравнение ширин дифракционных пиков и их амплитуд является корректным с учетом одинаковой толщины образцов и проводимой нормировки по амплитуде рефлекса от подложки (хастеллой). Ухудшение остроты текстуры с увеличением флюенса подтверждается и Phi-

сканом (103)YBCO (см. рис. 4 в). Обращает на себя внимание различный характер увеличения ширины пиков кривых качания (005)YBCO в параллельном (RD) и перпендикулярном (TD) ленте направленных в зависимости от величины флюенса: у необлученного образца кривые качания в двух перпендикулярных направлениях (RD и TD) имеют примерно одинаковую ширину, а у облученных образцов наблюдается однозначное уширение в направлении TD. Такое поведение подтверждает, что в образце реализуется аморфная структура регулярных треков с небольшим наклоном относительно кристаллографической плоскости *ab*.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведены систематические исследования электрофизических параметров и микроструктуры образцов до и после облучения ионами Хе с определенной ранее [12] энергией 167 МэВ и флюенсами до $1 \cdot 10^{12} \text{см}^{-2}$. Установлены оптимальные значения флюенса, при которых наблюдаются пиковые значения критического тока для различных внешних условий. Обнаружено, что с увеличением флюенса пик критического тока смещается в область более сильных магнитных полей. По результатам микроструктурных исследований выявлено, что в результате облучения образуются ионные треки диаметром порядка 6 нм. Образующиеся треки являются эффективными центрами пиннинга, что подтверждается анализом гистерезисных кривых намагничивания облученных образцов и результатами исследования их морфологии. Наблюдается снижение остроты текстуры при увеличении флюенса. Полученные результаты планируется использовать для расчета необходимых скоростей промотки ленты непосредственно через пучок ионов, что позволит создать технологию получения ВТСП-лент второго поколения с повышенной за счет проводимого радиационного пиннинга токонесущей способностью.

Финансирование. Работы осуществлены при поддержке коллаборации Ariadna MSTE по программе прикладных материаловедческих исследований. Проведение рентгенофазового анализа проводилось А.М.П. при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-49-10006). Магнитные измерения выполнены в ЦКП ФИАН им. П. Н. Лебедева РАН. Исследования микроструктуры и анализ полученных результатов выполнены при финансовой поддержке Министерства нау-

ки и высшего образования (Государственное задание ОИВТ РАН № 075-01129-23-00).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Markelov, A. Valikov, V. Chepikov, A. Petrzhik, B. Massalimov, P. Degtyarenko, R. Uzkih, A. Soldatenko, A. Molodyk, K. Sim, and S. Hwang, *Prog. Supercond. Cryog.* **21**, 29 (2019).
2. A. Malozemoff, *Annu. Rev. Mater. Res.* **42**, 373 (2012).
3. A. Abrikosov, *J. Phys. Chem. Solids* **2**, 199 (1957).
4. G. Blatter, M. Feigel'man, V. Geshkenbein, A. Larkin, and V. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
5. V. Selvamanickam, G. Carota, M. Funk, N. Vo, and P. Haldar, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **11**, 3379 (2001).
6. A. Catana, R. Broom, J. Bednorz, J. Mannhart, and D. Schlom, *Appl. Phys. Lett.* **60** 1016 (1992).
7. J. MacManus-Driscoll, S. Foltyn, Q. Jia, H. Wang, A. Serquis, B. Maiorov, L. Civale, Y. Lin, M. Hawley, M. Maley, and D. Peterson, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 5329 (2004).
8. N. Strickland, S. Wimbush, J. Kennedy, M. Ridgway, E. Talantsev, and N. Long, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **25**, 1 (2015).
9. A. Erb, E. Walker, and R. Flükiger, *Physica C Supercond.* **258**, 9 (1996).
10. C. Varanasi, P. Barnes, J. Burke, L. Brunke, I. Maartense, T. Haugan, E. Stinzianni, K. Dunn, and P. Haldar, *Supercond. Sci. Technol.* **19**, 37 (2006).
11. A. Molodyk, S. Samoilenkov, A. Markelov, P. Degtyarenko, S. Lee, V. Petrykin, M. Gaifullin, A. Mankevich, A. Vavilov, B. Sorbom, J. Cheng, S. Garberg, L. Kesler, Z. Hartwig, S. Gavrilkin, A. Tsvetkov, T. Okada, S. Awaji, D. Abramov, A. Francis, G. Bradford, D. Larbalestier, C. Senatore, M. Bonura, A. Pantoja, S. Wimbush, N. Strickland, and A. Vasiliev, *Sci Rep.* **11**, 2084 (2021).
12. E. Suvorova, P. Degtyarenko, I. Karateev, A. Ovcharov, A. Vasiliev, V. Skuratov, and P. Buffat, *J. Appl. Phys.* **126**, 145106 (2019).
13. E. Suvorova, P. Degtyarenko, A. Ovcharov, and A. Vasiliev, *J. Surf. Investig.* **16**, 112 (2022).
14. C. Bean, *Phys. Rev. Lett.* **8**, 250 (1962).
15. D. Larbalestier, A. Gurevich, D. Feldmann, and A. Polyanskii, *Nature* **414**, 368 (2001).

QUANTUM TRANSPORT THROUGH THE GRAPHENE-SILICENE NANORIBBONS JUNCTION

M. Najarsadeghi, A. A. Fouladi, A. Z. Rostami, A. Pahlavan*

*Department of Physics, Sari Branch, Islamic Azad University
4818168984 Sari, Iran*

Received October 6, 2022,
revised version December 15, 2023
Accepted for publication December 17, 2023

In this paper, the quantum transport through armchair graphene-silicene nanoribbons junction has been investigated by using non-equilibrium Green's function method and tight binding approximation in Landauer-Büttiker formalism. The results demonstrate that this junction exhibits metallic behavior in the absence of intrinsic spin-orbit interaction and by increasing the size of the intrinsic spin-orbit interaction, the transition from conductor to semiconductor for the system occurs. Moreover, the electron transport characteristics of the system can be controlled by changing the size of the length and width of the junction and the strength of GNR-SiNR coupling. These results can be useful for designing nanoelectronic devices.

DOI: 10.31857/S0044451024060105

1. INTRODUCTION

Two-dimensional hexagonal structures such as graphene and silicene have attracted a great deal of attention due to their unique electronic properties as well as their many applications in the manufacture of nanoelectronic devices [1–13]. Silicene, which is a monolayer, honeycomb structure of silicon atoms, has been successfully synthesized and many studies have been done on its electronic properties in recent years [14, 15]. Unlike graphene, silicene has no plate structure and has a buckled structure [16]. This feature of silicene is useful for adjusting the band gap, because of an external electric field effect transistors [17, 18]. Also, the spin-orbit interaction in silicene, unlike graphene, is large, which can be used to make spintronic devices [19]. Another useful feature of Silicene is its good compatibility with today's silicon-based electronics technology. Silicene nanoribbons, like graphene nanoribbons, can be divided into zigzag edges and armchair edges depending on the type of edge. The results show that the armchair silicene nanoribbons are the same as armchair graphene nanoribbons with width $N_w = 3m + 2$ (m is an integer) are conductive and the rest are semiconductors [20]. Recent investi-

gations have shown that hybrid nanostructures such as graphene-silicene heterostructures reveal greater physical properties than similar single graphene or silicene nanoribbons [21–26].

In this paper, electron transport through the armchair graphene-silicene nanoribbons junction (GNR-SiNR junction) has been studied numerically by using non-equilibrium Green's function and tight-binding approximation in Landauer-Büttiker formalism. The design model of this junction is shown in Fig. 1. In particular, the effect of the power of the intrinsic spin-orbit interaction, the strength of GNR-SiNR coupling, the length and width of the junction on the transmission probability function, and the electric current have been investigated.

2. METHODOLOGY

In this article, we characterize our method based on the GNR-SiNR junction consisting of armchair graphene/silicene nanoribbon as a central region (CR) contacted to two semi-infinite armchair GNR and SiNR electrodes, as shown in Fig. 1. To study the quantum transport properties of the GNR-SiNR junction, we decompose the total Hamiltonian of the system as

$$H = H_{CR} + H_R + H_L + H_C, \quad (1)$$

where $H_{CR} = H_{GNR} + H_{SiNR} + H_{GS}$ describes the Hamiltonian of the central region, $H_R(H_L)$ is the

* E-mail: a.ahmadifouladi@iausari.ac.ir

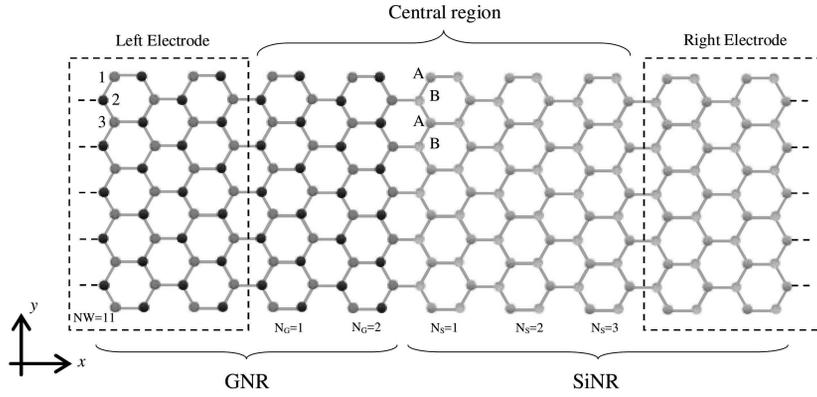


Fig. 1. Graphene nanoribbons (GNR), silicene- nanoribbons junction design. The left semi-infinite electrode is a graphene nanoribbons and the right semi-infinite electrode is a silicene nanoribbons that are connected to the central region

Hamiltonian of the right SiNR (left GNR) electrode, and H_C is the Hamiltonian for the coupling between CR and electrodes. Using the tight-binding model with nearest-neighbor hopping approximation, the Hamiltonians H_{GNR} , H_{SiNR} , and H_C can be expressed as follows:

$$H_{GNR} = \varepsilon \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} - t_G \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + H.c), \quad (2)$$

$$H_{SiNR} = -t_S \sum_{\langle ij \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha\beta} \eta_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_R \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha\beta} \xi_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^0)_{\alpha\beta}^z c_{j\beta}, \quad (3)$$

$$H_{GS} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{GS(i,j,\sigma)} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + H.c), \quad (4)$$

$$H_C = \sum_{i,j,\sigma} t_{c(i,j,\sigma)} (c_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + H.c), \quad (5)$$

$c_{i,\sigma}^\dagger$, and $c_{i,\sigma}$ ($d_{i,\sigma}^\dagger$, and $d_{i,\sigma}$) are the creation and annihilation operators of a π -electron at the i th site of the GNR-SiNR (electrodes), respectively. i and j stand for the nearest-neighbor pairs in the GNR and SiNR lattices. ε is the on-site energy. The hopping integral between the nearest-neighbor GNR(SiNR) lattice is $t_G = 2.7$ eV ($t_S = 1.6$ eV [27]). $\langle ij \rangle$ and $\langle\langle ij \rangle\rangle$ stand for the nearest-neighbor and next nearest-neighbor pairs in the SiNR lattice, respectively. The effective intrinsic spin-orbit interaction (SOI) parameter and the intrinsic

Rashba SOI parameter are λ_{SO} and λ_R , respectively. $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ is the Pauli matrix with $\eta_{ij} = -1$ ($\eta_{ij} = +1$) if the next-nearest neighbor hopping is clockwise (anticlockwise) with respect to the positive z -axis, and $\xi_{ij} = +1$ ($\xi_{ij} = -1$) for A(B) site. $\vec{d}_{ij}^0 = \frac{\vec{d}_{ij}}{|\vec{d}_{ij}|}$ is the unit vector parallel to the vector \vec{d}_{ij} connecting the two sites i and j in the same sublattice. H_{GR} is the Hamiltonian for the coupling between GNR-SiNR in the central region and t_{GS} is the coupling strength between the GNR and SiNR. Also, $t_c = t_G$ ($t_c = t_S$) is the coupling strength between left GNR (right SiNR) electrode and GNR (SiNR) in the central region. The Green's function of the system is expressed as

$$G(E) = [(E + i\eta)I - H_{GS} - \Sigma_{L,\sigma} - \Sigma_{R,\sigma}]^{-1}, \quad (6)$$

where I represents the identity matrix and $\eta \rightarrow 0^+$, E is the energy of the injecting electron. Σ_L and Σ_R are the self-energy matrices due to the connection of right and left electrodes to the central region, respectively, that can be calculated numerically by the recursive method described by Sancho and co-workers [28]. The surface Green's function of the right and left electrodes are calculated as

$$g_{0,0}^L = [(E + i0^+)I - H_{0,0} - H_{-1,0}^\dagger \tilde{T}]^{-1}, \quad (7)$$

$$g_{N+1,N+1}^R = [(E + i0^+)I - H_{N+1,N+1} - H_{N+1,N+2}^\dagger T]^{-1}, \quad (8)$$

where $H_{0,0}$ ($H_{N+1,N+1}$) and $H_{-1,0}$ ($H_{N+1,N+2}$) are the Hamiltonian of a unit-cell and the coupling matrix between two unit cells in the left (right) electrode, respectively. Here T and \tilde{T} are the transfer matrices,

which can be computed from the Hamiltonian matrix elements via an iterative procedure as [28]

$$T = t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_m, \quad (9)$$

$$\tilde{T} = \tilde{t}_0 + t_0 \tilde{t}_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_0 t_1 t_2 \dots \tilde{t}_m, \quad (10)$$

where t_i and \tilde{t}_i with $1 \leq i \leq m$ are defined by recursion formulas

$$t_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2, \quad (11)$$

$$\tilde{t}_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}^2. \quad (12)$$

The following conditions are applied to calculate \tilde{t}_i and t_i in Eq. (8) for the left electrode

$$\tilde{t}_0 = [(E + i0^+)I - H_{0,0}]^{-1} H_{-1,0}^\dagger, \quad (13)$$

$$t_0 = [(E + i0^+)I - H_{0,0}]^{-1} H_{-1,0}, \quad (14)$$

and for the right electrode in Eq. (9)

$$\tilde{t}_0 = [(E + i0^+)I - H_{N+1,N+1}]^{-1} H_{N+1,N+2}^\dagger, \quad (15)$$

$$t_0 = [(E + i0^+)I - H_{N+1,N+1}]^{-1} H_{N+1,N+2}. \quad (16)$$

The iteration is repeated until $\tilde{t}_m, t_m \leq \delta$ with δ arbitrarily small. Finally, we can calculate the self-energies of the two left and right electrodes by

$$\Sigma_L = H_{0,1}^\dagger g_{0,0}^L H_{0,1}, \quad (17)$$

$$\Sigma_R = H_{N,N+1} g_{N+1,N+1}^R H_{N,N+1}^\dagger. \quad (18)$$

The energy-dependent transmission function in terms of the Green's function of the central region and the coupling of it with two left and right electrodes can be written as

$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L(E) G^r(E) \Gamma_R(E) G^a(E)). \quad (19)$$

Where G^r (G^a) is the retarded (advanced) Green's function, and $\Gamma_{L(R)} = i(\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger)$ is the coupling matrix. The electric current can be calculated by the Landauer-Büttiker formula [29]:

$$I(V) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f_L - f_R] dE \quad (20)$$

where $f_{L(R)} = f(E - \mu_{L(R)})$ is the Fermi-Dirac distribution functions in the left (right) electrode with chemical potential $\mu_{L(R)} = E_F \pm \frac{eV}{2}$ and Fermi energy E_F .

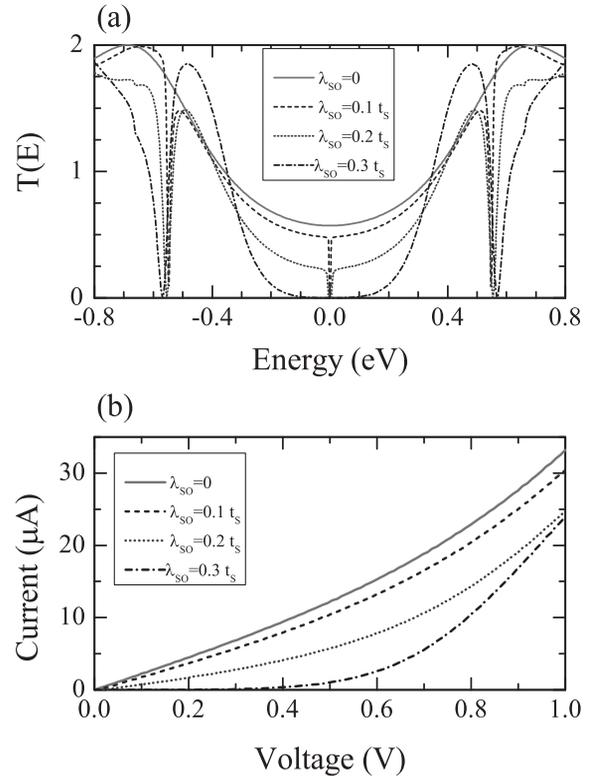


Fig. 2. *a* — Transmission function as a function of energy. *b* — The current-voltage characteristic for different values of λ_{SO} with $N_W = 11$, $N_S = 5$, $N_G = 5$

3. RESULTS AND DISCUSSION

In this section, we represent the results of the numerical calculations of the quantum transport of the GNR-SiNR system. The Fermi energy and temperature are chosen $E_F = 0$, $T = 4K$ respectively. Also, the intrinsic Rashba SOI parameter is $\lambda_R = 0.7 \text{ meV}$ [27]. The intrinsic and intrinsic Rashba spin-orbit interactions in graphene is omitted since it is negligible compared to the one in silicene [30, 31].

3.1. The effects of spin-orbit interaction

Figures 2 *a, b* illustrate the diagram of electron transmission probability in terms of energy and electric current in terms of bias voltage, respectively, for different values of λ_{SO} with $N_W = 11$, $N_S = 5$, $N_G = 5$. As it is shown in Fig. 2 *a*, the transmission probability diagram has oscillating behavior; whereas for a junction that all its parts are composed of graphene or silicene nanoribbons, the transmission function has a step form. This is due to the effect of quantum interference, which occurs due to the scattering of electron waves at the

junction of graphene and silicene nanoribbons due to the mismatch of transmission modes in these locations. In the transmission probability diagram, the resonant peaks are symmetrically located around the Dirac point ($E = 0$). In the absence of intrinsic spin-orbit interaction ($\lambda_{SO} = 0$), the probability of transmission at the Dirac point has a non-zero value, which indicates that the system is conductive. By increasing the value of λ_{SO} , it is observed that the probability of transmission at the Dirac point decreases and $\lambda_{SO} = 0.3t_s$ reaches zero and the gap in transmission function (the zero range of the transmission function around the Dirac point) appears. Thus, by increasing the λ_{SO} value, we see the transition from conductive to semiconductor for the system. Also, for $\lambda_{SO} \neq 0$ the probability of transmission in the energy range $\pm 0.5 \text{ eV} < E < \pm 0.5 \text{ eV}$ has a valley, which is called the anti-resonance state and is due to the destructive interference between the propagated states along the nanoribbons for the presence of spin-orbit interaction. As λ_{SO} increases, the amplitude of these anti-resonance modes increases. The important point is that for a system in which all parts (electrodes and central region) are composed of graphene nanoribbons, the transmission probability diagram has no gaps and the system is conductive. It also remains conductive for a system in which all parts are made of silicene nanoribbons, even in the presence of an intrinsic spin-orbit interaction. Therefore, by connecting graphene and silicene nanoribbons, a junction can be designed that has the property of switching from conductive to the semiconductor. We now interpret the current-voltage characteristic in Fig. 2 b. For λ_{SO} , there is no threshold voltage to turn on the current because of the lack of a gap in the transmission probability diagram. As λ_{SO} increases, the size of the current decreases due to a decrease in the probability of transmission near the Dirac point ($-0.3 \text{ eV} < E < 0.3 \text{ eV}$). As the λ_{SO} increases due to the appearance of the emission function gap, the magnitude of the threshold voltage to turn on the current also increases.

3.2. The study of geometric factors

Figure 3 investigates the effect of nanoribbon length on the electron transport properties for $N_W = 11$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$ values. In this case, we consider the length of the graphene nanoribbons to be constant ($N_G = 5$) and the length of the silicene nanoribbons (N_S) to be variable. As it is shown in Fig. 3 a, The nearest resonance peaks to the Dirac point move towards the Dirac point with the increase of N_S and the width of these peaks also decreases. However, the magni-

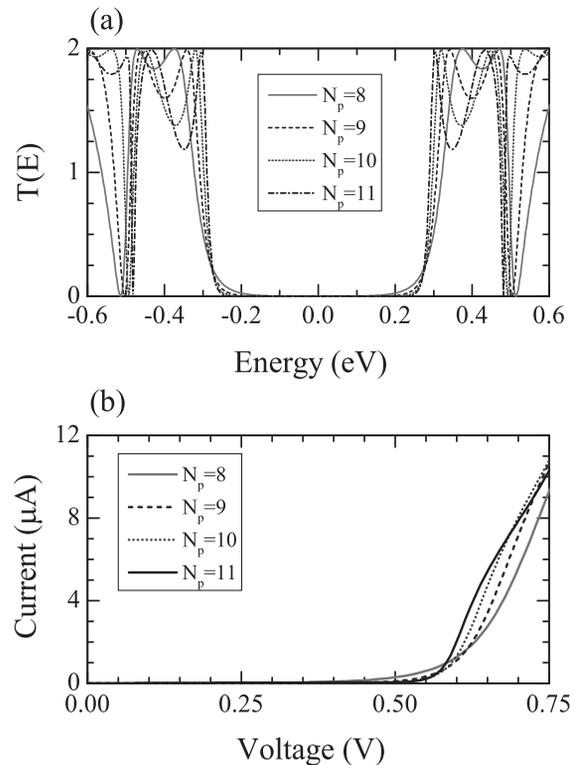


Fig. 3. a — Transmission function as a function energy. b — The current-voltage characteristic for different N_S values with $N_W = 11$, $N_G = 5$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$

tude of the probability of transmission near the Dirac point ($-0.27 \text{ eV} < E < 0.27 \text{ eV}$) decreases with increasing length. As a result of the gap, the probability of transmission increases with the increase of N_S . The effect of this gap increase is reflected in the diagram in a way that the threshold voltage increases with increasing N_S (see Fig. 3 a).

In Fig. 4, we investigated the effect of nanoribbon's width (N_W) size on the system's electronic transport for $N_W = 11$, $N_S = 5$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$ values. Figure 4 a represents the diagram of the energy transmission probability in terms of energy for different widths of the junction. As it is observed, as the width of the junction increases, the magnitude of the transmission probability decreases around the Dirac point ($-0.35 \text{ eV} < E < 0.35 \text{ eV}$), and the magnitude of the transmission probability gap increases (internal figure of Fig. 4 a). Also, the transmission function valleys approach the Dirac point by increasing the width of the nanoribbons. In Fig. 4 b, the effect of nanoribbon's width size on current-voltage characteristics is plotted. It is observed that with increasing the width of the nanoribbons, the threshold voltage increases, also

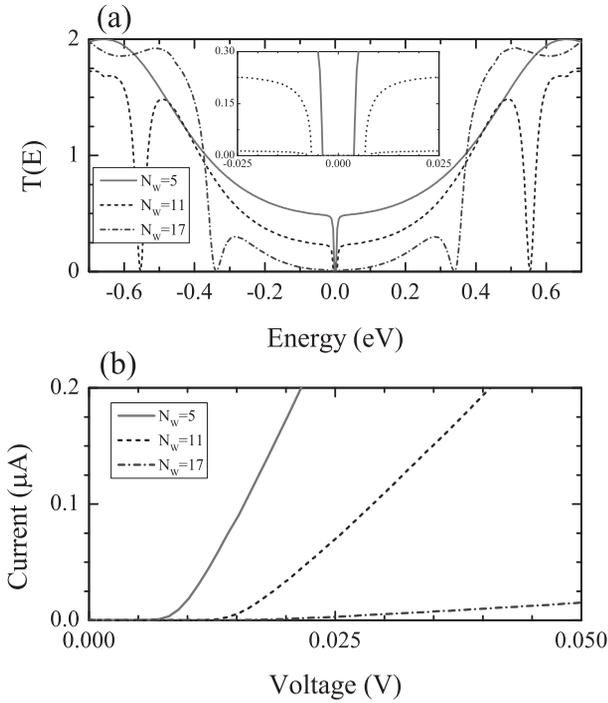


Fig. 4. *a* — Transmission function as a function energy. *b* — The current-voltage characteristic for different N_W values with $N_G = 5$, $N_S = 5$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$

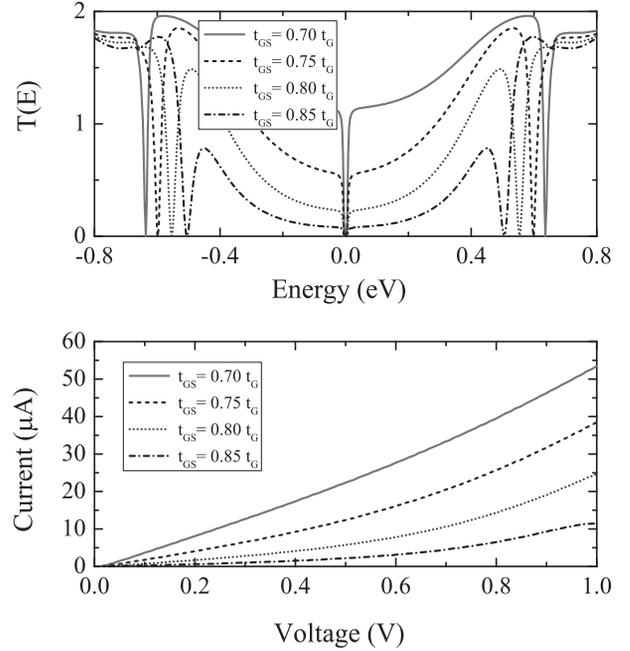


Fig. 5. *a* — Transmission function as a function energy. *b* — The current-voltage characteristic for different t_{GS} values with $N_W = 0$, $N_G = 5$, $N_S = 5$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$

the current size decreases. Therefore, by changing the geometry (length and width) of the nanoribbons, the electron transport characteristics of the system can be controlled.

3.3. The effect of the strength of GNR-SiNR coupling

Figure 5 investigates the effect of the strength of GNR-SiNR coupling (t_{GS}) on the electron transport properties of the system for $N_W = 0$, $N_G = 5$, $N_S = 5$, $\lambda_{SO} = 0.2t_s$. With the increase of t_{GS} , the anti-resonance dips become wider and smaller and approach zero energy (see Fig. 5 *a*). Also the anti-resonance dip at the zero energy becomes smaller. As a result, the current decreases with the increase of t_{GS} as seen in Fig. 5 *b*. This result shows how we can control the quantum transport of the system by changing the strength of GNR-SiNR coupling.

4. CONCLUSION

In this paper, the electron transport through the graphene-silicene nanoribbons junction is investigated

using the non-equilibrium Green's function method and tight-binding approximation in the Landauer-Büttiker formalism. The results show that the electron transport characteristics of the junction are very sensitive to the power of the intrinsic spin-orbit interaction quantity as well as the geometry (length and width) of the junction. In the presence of an intrinsic spin-orbit interaction quantity, the transmission function gap is created and the conductor to the semiconductor transition occurs. As the transmission function gap increases, the threshold voltage magnitude in the current-voltage characteristic increases. As the length of the junction increases, the width of the nearest resonant peaks to the Dirac point decreases and they move towards the Dirac point. The transmission probability gap also increases with increasing length, resulting in an increase in the threshold voltage magnitude. As the width of the nanoribbons increases, the magnitude of the transmission probability around the Dirac point decreases, the gap size of the transmission probability increases, and the valleys of the transmission function approach the Dirac point. Consequently, the magnitude of the electric current decreases, and the magnitude of the threshold voltage increases. These results can be used to control electron transport in nanoelectronic devices.

REFERENCES

1. M. Brzezinska, Y. Guan, O. V. Yazyev, S. Sachdev, and A. Kruchkov, *Engineering Syk Interactions in Disordered Graphene Flakes Under Realistic Experimental Conditions*, Phys. Rev. Lett. **131**, 036503 (2023), doi:10.1103/PhysRevLett.131.036503.
2. Y.-Z. Chou and S. Das Sarma, *Kondo Lattice Model in Magic-Angle Twisted Bilayer Graphene*, Phys. Rev. Lett. **131**, 026501 (2023), doi:10.1103/PhysRevLett.131.026501.
3. S. Jois, J. L. Lado, G. Gu, Q. Li, and J. U. Lee, *Andreev Reflection and Klein Tunneling in High-Temperature Superconductor-graphene Junctions*, Phys. Rev. Lett. **130**, 156201 (2023), doi:10.1103/PhysRevLett.130.156201.
4. C. Lu, Y. Gao, X. Cao, Y. Ren, Z. Han, Y. Cai, and Z. Wen, *Linear and Nonlinear Edge and Corner States in Graphenelike Moire Lattices*, Phys. Rev. B **108**, 014310 (2023), doi:10.1103/PhysRevB.108.014310.
5. G. Yu, Y. Wang, M. I. Katsnelson, and S. Yuan, *Origin of the Magic Angle in Twisted Bilayer Graphene From Hybridization of Valence and Conduction Bands*, Phys. Rev. B **108**, 045138 (2023), doi:10.1103/PhysRevB.108.045138.
6. M. Najarsadeghi, A. Ahmadi Fouladi, A. Z. Rostami, and A. Pahlavan, *Tunnel Magnetoresistance of Trilayer Graphene-Based Spin Valve*, Phys. E **144**, 115422 (2022), doi:10.1016/j.physe.2022.115422.
7. A. A. Fouladi, *Spin-Dependent Transport Properties of Aa-Stacked Bilayer Graphene Nanoribbon*, Phys. E **102**, 117 (2018), doi:10.1016/j.physe.2018.05.002.
8. A. A. Fouladi, *Effect of Uniaxial Strain on the Tunnel Magnetoresistance of T-Shaped Graphene Nanoribbon Based Spinvalve*, Superlattices and Microstructures **95**, 108 (2016), doi:10.1016/j.spmi.2016.04.043.
9. A. A. Fouladi and S. Ketabi, *Electronic Properties of Z-Shaped Graphene Nanoribbon Under Uniaxial Strain*, Phys. E **74**, 475 (2015), doi:10.1016/j.physe.2015.08.018.
10. G. Le Lay, *Silicene Transistors*, Nature Nanotech. **10**, 202 (2015), doi:10.1038/nnano.2015.10.
11. H. Emami-Nejad, A. mir, Z. Lorestaniweiss, A. Farmani, and R. Talebzadeh, *First Designing of a Silicene-Based Optical Mosfet With Outstanding Performance*, Sci. Rep. **13**, 6563 (2023), doi:10.1038/s41598-023-33620-2.
12. A. A. Fouladi, *Electronic Transport Properties of T-Shaped Silicene Nanoribbons*, Phys. E **91**, 101 (2017), doi:10.1016/j.physe.2016.10.040.
13. A. A. Fouladi, *Quantum Transport Through a Z-Shaped Silicene Nanoribbon*, Chinese Phys. B **26**, 047304 (2017), doi:10.1088/1674-1056/26/4/047304.
14. B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, and B. Aufray, *Epitaxial Growth of a Silicene Sheet*, Appl. Phys. Lett. **97**, 223109 (2010), doi:10.1063/1.3524215.
15. C. Grazianetti, E. Cinquanta, and A. Molle, *Two-Dimensional Silicon: The Advent of Silicene*, 2D Materials **3**, 012001 (2016), doi:10.1088/2053-1583/3/1/012001.
16. P. Vogt, P. Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay, *Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon*, Phys. Rev. Lett. **108**, 155501 (2012), doi:10.1103/PhysRevLett.108.155501.
17. M. Ezawa, *A Topological Insulator and Helical Zero Mode in Silicene Under an Inhomogeneous Electric Field*, New J. Phys. **14**, 033003 (2012), doi:10.1088/1367-2630/14/3/033003.
18. N. Drummond, V. Zolyomi, and V. Falko, *Electrically Tunable Band Gap in Silicene*, Phys. Rev. B **85**, doi:10.1103/PhysRevB.85.075423.
19. Z. Zhu, Y. Cheng, U. Schwingenschlogl, *Giant Spin-Orbit-Induced Spin Splitting in Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenide Semiconductors*, Phys. Rev. B **84**, 153402 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.84.153402.
20. Y. Ding and J. Ni, *Electronic Structures of Silicon Nanoribbons*, Applied Phys. Lett. **95**, 083115 (2009), doi:10.1063/1.3211968.
21. B. Kiraly, A. J. Mannix, M. C. Hersam, and N. P. Guisinger, *Graphene-silicon Heterostructures at the Two-Dimensional Limit*, Chemistry of Materials **27**, 6085 (2015), doi:10.1021/acs.chemmater.5b02602.
22. L. Meng, Y. Wang, L. Li, and H.-J. Gao, *Fabrication of Graphene-silicon Layered Heterostructures by Carbon Penetration of Silicon Film*, Nanotechnology **28**, 084003 (2017), doi:10.1088/1361-6528/aa53cf.
23. G. Li, L. Zhang, W. Xu, J. Pan, S. Song, Y. Zhang, H. Zhou, Y. Wang, L. Bao, Y.-Y. Zhang, S. Du, M. Ouyang, S. T. Pantelides, and H.-J. Gao, *Stable Silicene in Graphene/silicene Van Der Waals Heterostructures*, Advanced Materials **30**, 1804650 (2018), doi:10.1002/adma.201804650.

24. B. Liu, J. A. Baimova, C. D. Reddy, S. V. Dmitriev, W. K. Law, X. Q. Feng, and K. Zhou, *Interface Thermal Conductance and Rectification in Hybrid Graphene/silicene Monolayer*, Carbon **79**, 236 (2014), doi:10.1016/j.carbon.2014.07.064.
25. H. Pourmirzaagha and S. Rouhi, *Molecular Dynamic Simulations of the Heat Transfer in Double-Layered Graphene/Silicene Nanosheets*, Phys. B **666**, 415079 (2023), doi:10.1016/j.physb.2023.415079.
26. J. Zhou, H. Li, H.-K. Tang, L. Shao, K. Han, and X. Shen, *Phonon Thermal Transport in Silicene/graphene Heterobilayer Nanostructures: Effect of Interlayer Interactions*, ACS Omega **7**, 5844 (2022), doi:10.1021/acsomega.1c05932.
27. C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Low-Energy Effective Hamiltonian Involving Spin-Orbit Coupling in Silicene and Two-Dimensional Germanium and Tin*, Phys. Rev. B **84**, 195430 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.84.195430.
28. M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, *Highly Convergent Schemes for the Calculation of Bulk and Surface Green Functions*, J. Phys. F: Metal Physics **15**, 851 (1985), doi:10.1088/0305-4608/15/4/009.
29. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
30. J. C. Boettger and S. B. Trickey, *First-Principles Calculation of the Spin-Orbit Splitting in Graphene*, Phys. Rev. B **75**, 121402 (2007), doi:10.1103/PhysRevB.75.121402.
31. H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, *Intrinsic and Rashba Spin-Orbit Interactions in Graphene Sheets*, Phys. Rev. B **74**, 165310 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.74.165310.

ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК НА СОСТОЯНИЯ ВАКАНСИЙ РТУТИ С ИСПУСКАНИЕМ ОДИНОЧНОГО ОПТИЧЕСКОГО ФОНОНА ПРИ РЕКОМБИНАЦИИ ШОКЛИ – РИДА – ХОЛЛА В УЗКОЗОННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ HgCdTe

Д. В. Козлов ^{a,b}, В. В. Румянцев ^{a,b}, А. А. Янцер ^{a,b*}, С. В. Морозов ^{a,b}, В. И. Гавриленко ^{a,b}

^a Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

^b Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 6 ноября 2023 г.,
после переработки 16 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

Расчитано время рекомбинации Шокли – Риды – Холла (ШРХ) при захвате носителей заряда на состояния вакансии ртути в твердых растворах HgCdTe с шириной запрещенной зоны около 40 мэВ. В рассматриваемом случае захват как электрона, так и дырки возможен за счет испускания одного оптического фонона. Установлено, что при $T = 4.2$ и 77 К рекомбинация ШРХ определяет общее время жизни носителей в материале p -типа при концентрации центров рекомбинации более $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, что позволяет управлять временем жизни носителей за счет изменения концентрации вакансий ртути.

DOI: 10.31857/S0044451024060117

1. ВВЕДЕНИЕ

На протяжении нескольких десятилетий HgCdTe остается одним из основных материалов для детектирования инфракрасного излучения [1]. Диапазон доступных длин волн для коммерческих межзонных фотодетекторов на основе HgCdTe простирается от ближнего ИК-диапазона приблизительно до 25 мкм, что обусловлено широкими возможностями по варьированию ширины запрещенной зоны твердого раствора. Поскольку HgTe имеет фактически нулевую ширину запрещенной зоны, в приемниках на основе растворов HgCdTe с высоким содержанием Hg в принципе достижимы рабочие длины волн более 25 мкм. Однако на пути к дальнему ИК-диапазону возникает ряд препятствий. Помимо технологических сложностей, таких как флуктуации состава или проблемы с легированием p -типа для фотодиодов, существуют фундаментальные ограничения на детектирующую способность материала, связанные с временем жизни носителей. С умень-

шением ширины запрещенной зоны ускорение процессов безызлучательной рекомбинации приводит к уменьшению времени жизни носителей и соответствующему снижению чувствительности. Несмотря на то, что эта тема интенсивно исследовалась на протяжении нескольких десятилетий, до сих пор остаются некоторые количественные неопределенности, в частности, в отношении оже-рекомбинации [2]. Другой тип безызлучательных процессов — рекомбинация Шокли – Риды – Холла (ШРХ) связан с дефектными/примесными центрами, которые всегда присутствуют в HgCdTe по крайней мере за счет вакансий ртути. В HgCdTe формирование вакансий фактически неизбежно из-за слабой связи Hg–Te, при этом их энергетический спектр все еще является предметом дискуссий [3–5]. Увеличение концентрации вакансий ртути путем постростового отжига часто используется для конверсии типа проводимости пленок HgCdTe из электронного в дырочный. Времена жизни носителей при конверсии, как правило, значительно уменьшаются [6] предположительно из-за того, что возникающие вакансии ртути служат дополнительными центрами рекомбинации. С другой стороны, малые времена жизни носителей

* E-mail: yantser@ipmras.ru

позволяют создавать быстродействующие приемники ИК-излучения, в том числе гетеродинного типа. Гетеродинные приемники и смесители в длинноволновой части среднего ИК могут быть интересны для спектроскопии в астрофизике. В частности, изучение спектров эмиссии космических объектов, таких как туманности, на характеристических линиях водорода (28.221 мкм, 17.035 мкм, 12.279 мкм, 9.665 мкм, 8.026 мкм) позволяет визуализировать нагрев и остывание таких объектов, как ударные волны и столкновения, и другие эффекты [7].

Вакансия ртути является двухзарядным или двойным акцептором. Такой акцептор может находиться в трех зарядовых состояниях: нейтральный A_2^0 -центр, с которым связаны две дырки, однократно ионизованный A_2^{-1} -центр, с которым связана одна дырка, и, наконец, полностью ионизованный A_2^{-2} -центр. Из-за большого количества исследований разброс известных из литературы энергий ионизации для A_2^0 -центра и A_2^{-1} -центра весьма велик. Однако наличие состояний, отстоящих от края валентной зоны на 15–20 мэВ, установлено достаточно надежно [8–11]. Отметим, что сложность в однозначном определении энергии ионизации в данном случае связана еще и с тем, что она перекрывается с энергией оптических фононов, которые в твердом растворе представлены HgTe-подобными и CdTe-подобными модами с энергиями от 15 до 17.5 мэВ и от 16 до 20 мэВ соответственно. Таким образом, если ширина запрещенной зоны в материале составляет от 30 до 40 мэВ (при доле Cd в твердом растворе 18.8%), можно ожидать, что дискретный уровень дефекта оказывается вблизи середины запрещенной зоны. В процессе рекомбинации ШРХ через вакансии ртути возможны следующие каналы рекомбинации:

- Через нейтральные вакансии (A_2^0 -центры). Электрон захватывается на нейтральный центр, образуется A_2^{-1} -центр. Затем на этот центр захватывается дырка (процесс 1: $A_2^0 + e = A_2^{-1}$, $A_2^{-1} + h = A_2^0$).
- Через A_2^{-1} -центр. Либо дырка захватывается на A_2^{-1} -центр с образованием нейтральной вакансии, а затем на нее захватывается электрон (процесс 2: $A_2^{-1} + h = A_2^0$, $A_2^0 + e = A_2^{-1}$). Либо электрон захватывается на A_2^{-1} -центр с образованием A_2^{-2} -центра, а затем на этот центр захватывается дырка (процесс 3: $A_2^{-1} + e = A_2^{-2}$, $A_2^{-2} + h = A_2^{-1}$).
- Через A_2^{-2} -центр. Дырка захватывается на полностью ионизованную вакансию с образованием A_2^{-1} -центра, затем на этот центр захватывается электрон (процесс 4: $A_2^{-2} + h = A_2^{-1}$, $A_2^{-1} + e = A_2^{-2}$).

Безызлучательный захват как дырки, так и электрона происходит с испусканием оптических и акустических фононов. При всех таких процессах должен выполняться закон сохранения энергии: разность между энергией состояния континуума и энергией состояния примесно-дефектного центра должна быть равна энергии фонона. В настоящей работе мы сосредоточимся на рассмотрении процессов рекомбинации ШРХ в материале с шириной запрещенной зоны от 35 до 40 мэВ. Соответствующий данным энергиям диапазон длин волн (от 30 до 35 мкм) представляется следующим естественным «рубежом» для продвижения приемников на основе HgCdTe в длинноволновую область. В качестве центра рекомбинации будет рассмотрен A_2^{-1} -центр с энергией ионизации 20 мэВ, обнаруженный ранее в серии работ по исследованию эпитаксиальных слоев HgCdTe, выращенных методом МЛЭ [12, 13]. Таким образом, в рассматриваемом случае захват как дырки, так и электрона на состояние может происходить с испусканием одного оптического фонона. Сравнение результатов расчетов с характерными временами для других процессов рекомбинации (ожерекомбинация и излучательная рекомбинация) показывает, что рассматриваемый тип рекомбинации ШРХ может быть доминирующим каналом релаксации неравновесной концентрации носителей как при температуре жидкого гелия, так и при температуре жидкого азота.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Ниже будут рассчитаны времена захвата дырок на состояния A_2^{-2} -центра и времена захвата электронов на A_2^{-1} -центр с испусканием одиночных оптических фононов (процессы 3, 4). В первом случае носитель должен потерять энергию равную энергии ионизации A_2^{-1} -центра (E_2), во втором случае передаваемая фонону электроном энергия равна $E_g - E_2$, где E_g — ширина запрещенной зоны. Как уже отмечалось, энергия связи A_2^{-1} -центра в узкозонных (до 50 мэВ) слоях HgCdTe составляет около 20 мэВ, а ширина запрещенной зоны быстро меняется в зависимости от состава твердого раствора. В случае испускания оптического фонона будем использовать золотое правило Ферми для расчета интенсивности

переходов носителей из валентной зоны и зоны проводимости на основное состояние A_2^{-1} -центра вакансии ртути. Из-за колебаний решетки вводится поправка к потенциалу кристалла (δV), которую можно разложить на две составляющие: электростатическое макрполе ($\delta\bar{V}$) и деформационное поле ($\delta\tilde{V}$): $\delta V = \delta\tilde{V} + \delta\bar{V}$ [14]. Макрполе возникает только в полярных полупроводниках, так как из-за смещения атомов решетки возникает поляризация. В полярных полупроводниках носители взаимодействуют с макрполем гораздо сильнее, чем с деформационным потенциалом [14], поэтому в дальнейших расчетах будет учитываться только рассеяние на макрполе (ПО-механизм).

Как известно из [14], вероятность испускания поперечного оптического фонона в этом случае равна нулю. Если же рассматривать вероятность испускания продольного фонона в единицу времени в случае перехода дырки из валентной зоны или электрона из зоны проводимости на основное состояние акцептора A_2^{-1} -центра, то она имеет вид [14]

$$W_{if} = \int \left(\frac{16\pi^3 a^3}{\mu\omega_{LO}(q)} \right) \frac{e^2\gamma^2}{q^2} |\langle \Psi_{cont} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \Psi_0 \rangle|^2 \times (N_{\Phi}(q) + 1) \delta(\varepsilon_{cont} - \hbar\omega_{LO}(q) - \varepsilon_0) d^3\mathbf{q}, \quad (1)$$

где i и f — начальное и конечное состояние соответственно, $N_{\Phi}(q)$ — числа заполнения фононных состояний, $\mu = m_{Hg}m_{Te}/(m_{Hg} + m_{Te})$ — приведенная масса атомов элементарной ячейки (атомов теллура и ртути), \mathbf{q} — волновой вектор фонона, ω_{LO} — частота продольного оптического фонона (HgTe-подобного или CdTe-подобного), a — постоянная решетки твердого раствора $Hg_{1-x}Cd_xTe$, $\Psi_{cont,0}$, $\varepsilon_{cont,0}$ — волновые функции и энергии состояний непрерывного спектра и основного локализованного акцепторного уровня (A_2^{-2} -центра вакансии ртути). Согласно [14], значение коэффициента γ для продольных оптических фононов представлено как

$$\gamma = \sqrt{\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{\mu}{a^3} \omega_{LO}(0)}, \quad (2)$$

где $\kappa_{\infty,0}$ — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости твердого раствора HgCdTe соответственно, $\omega_{LO}(0)$ — частота продольного оптического фонона при $q = 0$. Значения для HgTe и CdTe из [15] использовались, чтобы получить значения диэлектрических проницаемостей для твердого раствора методом линейной интерполяции. Согласно [16], $\omega_{LO}(0) = 4.85 \cdot 10^{12}$ Гц и $4.24 \cdot 10^{12}$ Гц для CdTe-подобного и HgTe-подобного

фононов соответственно. Энергии и огибающие волновых функций дырок были получены решением уравнения Шредингера, которое включало в себя гамильтониан Кейна, потенциал иона акцептора и потенциал центральной ячейки, описывающий химический сдвиг. Данный метод подробно описан в [13]. Волновые функции состояний дырок непрерывного спектра рассчитывались вне борновского приближения с учетом потенциала примесного центра [13], а волновые функции электронов в зоне проводимости выбирались в виде плоских волн.

Интегрируя выражение (1) по состояниям непрерывного спектра в валентной зоне/зоне проводимости с учетом функции распределения дырок/электронов, можно получить частоту захвата частицы (обратное время захвата) из непрерывного спектра:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{cont} W_{cont \rightarrow f} f_{p,n}. \quad (3)$$

В работе [17] показано, что время жизни пьезоакустического рассеяния электронов в зоне проводимости в слоях HgCdTe составляет доли пикосекунд. Поэтому функции распределения $f_{p,n}$ можно считать квазиравновесными:

$$f_{p,n} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_{cont} - F_{p,n}}{T}\right)}, \quad (4)$$

где $F_{p,n}$ — квазиуровень Ферми для дырок и электронов соответственно, ε_{cont} — энергия частицы в континууме зоны проводимости или валентной зоны.

Положение квазиуровня Ферми для дырок находится в зависимости от концентрации дырок в валентной зоне и температуры согласно выражению [18]

$$p = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp\left(\frac{-E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} + F_p}{T}\right) \right)^{-1} d^3\mathbf{k} + \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp\left(\frac{-E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} + F_p}{T}\right) \right)^{-1} d^3\mathbf{k}. \quad (5)$$

Здесь m_{hh} и m_{lh} — эффективные массы тяжелых и легких дырок в твердом растворе HgCdTe соответственно, E_V — энергия потолка валентной зоны, T — температура в энергетических единицах. Отметим, что масса легких дырок на порядок меньше массы тяжелых дырок, поэтому второе слагаемое в выражении (2) оказывается много меньше первого и им

можно пренебречь. Рассчитанное положение уровня Ферми было использовано при расчете частоты захвата дырок из валентной зоны согласно выражению (3).

Положение квазиуровня Ферми для электронов находится в зависимости от концентрации электронов в зоне проводимости согласно выражению [18]

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp \frac{E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - F_e}{T} \right)^{-1} d^3 \mathbf{k}. \quad (6)$$

Здесь m_e — эффективная масса электронов в твердом растворе HgCdTe, E_c — энергия дна зоны проводимости HgCdTe.

Для анализа полученных результатов применительно к реальным структурам, получаемым методом МЛЭ [19], кроме времени жизни носителей в рассматриваемом процессе ШРХ, необходимо определить и характерные времена других процессов: межзонной рекомбинации при излучательных переходах, а также оже-процессов. Времена излучательной и оже-рекомбинации в настоящей работе рассчитывались по широко используемым в литературе приближенным аналитическим формулам, приведенным, например, в работах [2, 20]. В выражении для времени оже-рекомбинации помимо констант, характеризующих материал, входит пороговая энергия (E_{th}) различных оже-процессов и параметр $|F1F2|^2$. В настоящей работе пороговые энергии рассчитывались не приближенно (аналитически), а численно на основе энергетического спектра, получаемого в модели Берта–Форемана с гамильтонианом Кейна 8×8 [21, 21]. $F1$ и $F2$ представляют собой интегралы перекрытия волновых функций в различных состояниях, занимаемых электронами при оже-процессе. Аналитическое выражение для $F1$ и $F2$ можно найти в классической работе Бити и Лансберга [23], однако в подавляющем большинстве работ величина $|F1F2|^2$ рассматривается как подгоночный параметр [24]. Как правило, в большинстве публикаций $|F1F2| \sim 0.2$, однако в последних работах встречаются значения порядка 0.05. Для того чтобы учесть данные различных публикаций при анализе результатов настоящей работы, ниже приведены времена оже-рекомбинации для значений $|F1F2|$ во всем диапазоне от 0.05 до 0.2.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Были рассчитаны частоты захвата электронов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центры при испускании одиночных оптических фононов. Отметим,

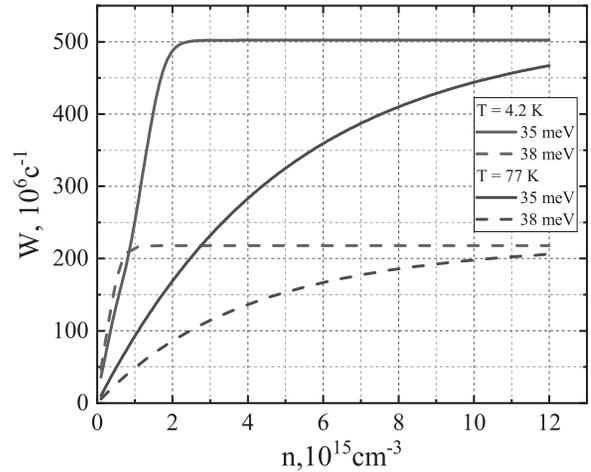


Рис. 1. Рассчитанные частоты переходов электронов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центр в зависимости от их концентрации при различных значениях ширины запрещенной зоны HgCdTe. Расчет выполнен для диапазона концентраций от 10^{13} см^{-3} до $1.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

что в отличие от процесса захвата дырок на акцепторные уровни, захват электронов может происходить только напрямую на основной уровень акцептора, поскольку нет промежуточных уровней между зоной проводимости и основным акцепторным состоянием. Расчет частоты захвата электронов из зоны проводимости проводился на основном уровне A_2^{-1} -центра, расположенный на 20 мэВ выше края валентной зоны. Поскольку энергии оптических фононов лежат в пределах от 15 до 17.5 мэВ для HgTe-подобного фонона и от 18 до 20 мэВ для CdTe-подобного фонона, переходы электронов на основное состояние A_2^{-1} -центра будут происходить, если ширина запрещенной зоны E_g находится в пределах от 35 до 40 мэВ.

На рис.1 представлены рассчитанные частоты переходов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центр в зависимости от концентрации электронов в зоне при различных значениях E_g и температуры T . Видно, что при увеличении концентрации от 10^{13} см^{-3} наблюдается линейный рост интенсивности переходов, выходящий на насыщение выше некоторой концентрации носителей в зоне проводимости. Это связано с тем, что переходы на акцепторные состояния возможны для носителей, имеющих кинетическую энергию лишь в определенном диапазоне. Для ширины запрещенной зоны 38 мэВ это не более $20 - 18 = 2 \text{ мэВ}$ (разница между максимальной энергией оптического фонона и величиной энергетического зазора между краем зоны проводимости и

акцепторным уровнем), а для ширины запрещенной зоны 35 мэВ не более $20 - 15 = 5$ мэВ. С увеличением концентрации частота переходов сначала растет из-за увеличения числа частиц, испускающих фононы, а затем, когда уровень Ферми оказывается выше края зоны больше чем на 2 (5) мэВ и число частиц, участвующих в переходах, становится постоянным, рост частоты переходов прекращается. При температуре жидкого азота зависимость частоты переходов от концентрации носителей в зоне более плавная из-за размытия функции распределения электронов в зоне проводимости при повышении температуры. Видно, что время испускания оптического фотона при захвате электронов на центр A_2^{-1} для достаточно высокой концентрации носителей в зоне оказывается порядка 2 – 5 нс.

Также были рассчитаны частоты переходов дырок из валентной зоны при испускании оптического фотона на основное состояние A_2^{-2} -центра вакансии ртути. Оказалось, что время такого перехода для твердого раствора с долей кадмия 18.8 % и с шириной запрещенной зоны 36 мэВ (при этом энергия ионизации A_2^{-2} -центра составляет 18 мэВ) составляет 3 пс. Таким образом, время захвата электронов на A_2^{-1} -центр вакансии ртути оказалось на три порядка больше времени захвата дырок. Поэтому можно ожидать, что время рекомбинации ШРХ определяется переходами электронов. В этом случае время рекомбинации ШРХ можно рассчитать по следующей формуле (см. Приложение):

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2^{-1}}} \right). \quad (7)$$

Здесь τ_{SRH} — время релаксации числа электронов в зоне проводимости, τ_{ph} — время испускания фотона при захвате на один центр, $N_{A_2^{-1}}$ — концентрация A_2^{-1} -центров, n — концентрация электронов. Таким образом, чтобы рассчитать время рекомбинации ШРХ в узкозонных слоях HgCdTe нужно знать не только время испускания фотона, но и число центров захвата носителей, т. е. число A_2^{-1} -центров. Число таких центров складывается из равновесного числа A_2^{-1} -центров ($N_{A_2^{-1}}^P$) и числа центров, сгенерированных возбуждающим излучением ($N_{A_2^{-1}}^G$):

$$N_{A_2^{-1}} = N_{A_2^{-1}}^P + N_{A_2^{-1}}^G.$$

Учитывая, что процесс захвата дырок на вакансии ртути на три порядка быстрее захвата электронов на такие центры, можно считать, что при рассмотрении процессов релаксации электронов уже

установилось стационарное распределение дырок по состояниям.

Рассмотрим следующие случаи.

3.1. Материал n -типа

В этом случае при низкой температуре все вакансии ртути оказываются в зарядовом состоянии A_2^{-2} (акцепторные центры свободны от дырок). A_2^{-1} -центры возникают благодаря захвату сгенерированных возбуждающим излучением дырок ($N_{A_2^{-1}} = N_{A_2^{-1}}^G$). При этом их концентрация равна концентрации неравновесных дырок (Δp), если число таких дырок не превышает число вакансий ртути, в противном случае дырки полностью заполнят A_2^{-2} -центры (с образованием A_2^{-1} -центров), и оставшиеся частицы будут заполнять появившиеся A_2^{-1} -центры с образованием нейтральных вакансий ртути. Таким образом, в случае HgCdTe — материала электронного типа — справедливо соотношение $N_{A_2^{-1}} \leq \Delta p$. Поскольку при оптическом возбуждении число неравновесных дырок равно числу неравновесных электронов (Δn) для времени рекомбинации ШРХ из соотношения (7) имеем

$$\tau_{SRH} \geq \tau_{ph} \left(\frac{n}{\Delta n} \right). \quad (8)$$

Равенство в соотношении (8) реализуется, когда число вакансий ртути больше числа сгенерированных дырок, т. е. в случае малой интенсивности возбуждения. В случае материала n -типа время жизни неравновесных носителей в процессе рекомбинации ШРХ зависит от их концентрации, даже когда последняя меньше темновой концентрации электронов. Это может приводить к существенно не экспоненциальной динамике релаксации избыточной концентрации носителей, что затрудняет анализ экспериментальных кривых. Поскольку число A_2^{-1} -центров меньше полного числа вакансий ртути, для оценки минимального времени рекомбинации ШРХ из выражения (7) можно использовать следующее соотношение:

$$\tau_{SRH} \geq \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2}} \right). \quad (9)$$

Равенство в выражении (9) реализуется, когда число дырок, возникающих при накачке, оказывается равно числу двойных акцепторов. При $T = 4.2$ К оценка времени рекомбинации ШРХ из (9) для HgCdTe с шириной запрещенной зоны 35 мэВ дает величину около 170 нс для равновесной концентрации электронов $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и концентрации вакансий ртути $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, что удовлетворительно согласуется с

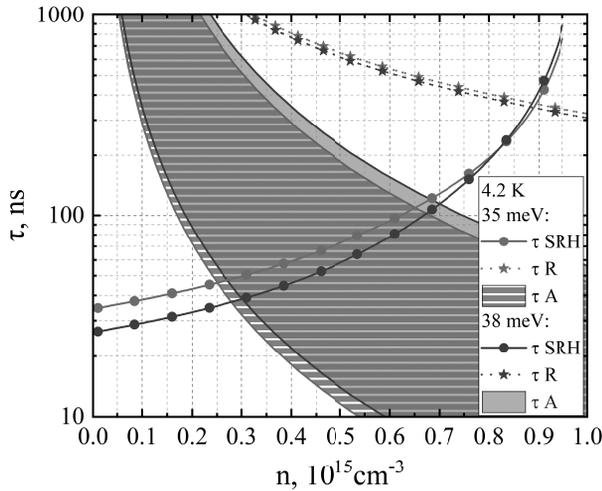


Рис. 2. Рассчитанные для $T = 4.2$ К времена рекомбинации в HgCdTe p -типа в зависимости от концентрации свободных электронов в зоне проводимости. Концентрация компенсирующих доноров равна 10^{15} см^{-3}

экспериментальными данными [25]. При $T = 77$ К оцениваемые времена рекомбинации ШРХ превышают 500 нс и, таким образом, не дают значимого вклада в общее время рекомбинации, поскольку времена оже-рекомбинации оказываются значительно меньше.

3.2. Материал p -типа при $T = 4.2$ К

Равновесное число A_2^{-1} -центров при низкой температуре определяется степенью компенсации: число таких центров равно числу компенсирующих доноров (N_D). При наличии подсветки, как уже отмечалось, сгенерированные дырки за время около 3 пс переходят на A_2^{-1} -центры, превращая их в нейтральные A_2^0 -центры. Тогда число A_2^{-1} -центров при подсветке:

$$N_{A_2^{-1}} = N_d - \Delta p \quad (10)$$

Тогда, с учетом того, что $\Delta p = \Delta n$ и концентрация равновесных электронов при низкой температуре пренебрежимо мала, выражение (7) в этом случае принимает вид

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{\Delta n}{N_d - \Delta n} \right). \quad (11)$$

На рис.2 представлены графики зависимости времен жизни носителей для трех процессов рекомбинации (рекомбинация ШРХ (τ_{SRH}), рассчитанная из (10), излучательная рекомбинация (τ_R)

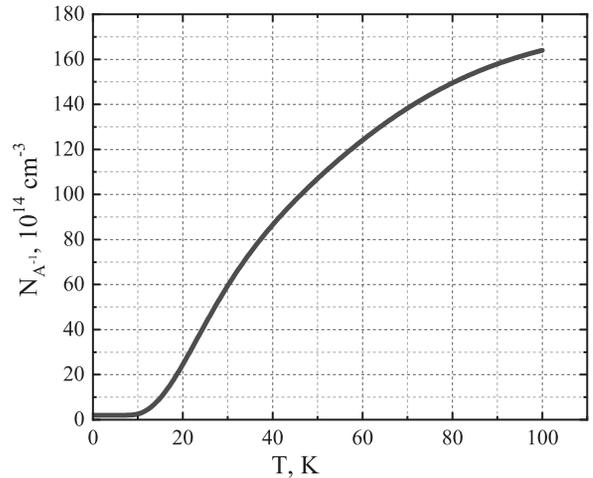


Рис. 3. Зависимость от температуры равновесной концентрации A_2^{-1} -центров вакансий ртути в слое HgCdTe с долей Cd в растворе $x = 17.7\%$. Концентрация компенсирующих доноров составляет $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, концентрация вакансий ртути $N_A = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

и оже-рекомбинации (τ_A) от концентрации свободных электронов в зоне проводимости при $T = 4.2$ К. Расчеты проводились для слоя HgCdTe p -типа, которому соответствуют $E_g = 35$ мэВ и $E_g = 38$ мэВ. Концентрация компенсирующих доноров N_D выбрана равной 10^{15} см^{-3} . Концентрация вакансий ртути предполагается $N_A > N_D$. Для времени оже-рекомбинации τ_A показан диапазон значений, соответствующий варьированию подгоночного параметра $|F1F2|$ в пределах от 0.05 до 0.2, аналогично работе [2]. Учитывая, что общее время релаксации τ определяется как

$$\tau^{-1} = \tau_R^{-1} + \tau_{SRH}^{-1} + \tau_A^{-1}, \quad (12)$$

оно соответствует наименьшему времени рекомбинации. На рис.2 видно, что время рекомбинации ШРХ будет оказывать заметное влияние на τ в материале p -типа при концентрации свободных электронов (сумма равновесной и неравновесной концентрации) в зоне проводимости вплоть до значений порядка $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ или порядка $6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в зависимости от величины $|F1F2|^2$. При больших концентрациях неравновесных электронов общее время рекомбинации контролируется оже-процессами.

3.3. Материал p -типа при $T=77$ К

На рис.3 представлена зависимость от температуры равновесной концентрации A_2^{-1} -центров в слое HgCdTe с долей Cd в растворе $x = 17.7\%$. Зависимость рассчитана методом, представленном в работе [26]. Концентрация вакансий ртути

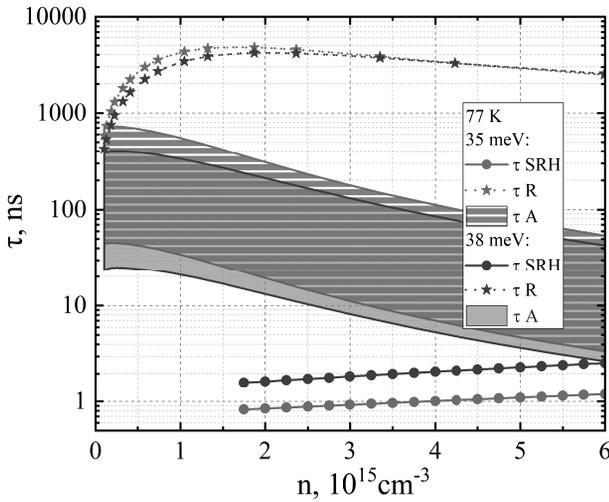


Рис. 4. Рассчитанные для $T = 77$ К времена рекомбинации в HgCdTe p -типа в зависимости от концентрации свободных электронов в зоне проводимости. Концентрация компенсирующих доноров составляет $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, концентрация вакансий ртути $N_A = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

$N_A = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ была выбрана на уровне максимально достижимой для низкотемпературных отжигов HgCdTe [27]. При $T = 77$ К равновесная концентрация свободных электронов в зоне проводимости была равна $1.75 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, что соответствует типичной «темновой» концентрации в эпитаксиальных пленках, выращиваемых методом МЛЭ [19].

На рис.3 видно, что концентрация $N_{A_2^{-1}}$ при $T = 77$ К составляет $1.4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Следует отметить, что ширина запрещенной зоны в пленке с $x = 17.7\%$ при $T = 77$ К составляет около 38 мэВ.

На рис. 4 представлен график зависимости времен жизни носителей для трех процессов рекомбинации в материале HgCdTe p -типа с $E_g = 35$ мэВ и $E_g = 38$ мэВ. Видно, что время рекомбинации ШРХ составляет порядка нескольких наносекунд в широком диапазоне значений полной концентрации электронов в зоне проводимости и определяет общее время жизни. При увеличении неравновесной концентрации электронов выше $6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ выражение для времени рекомбинации ШРХ без учета изменения заселенности вакансий ртути неравновесными дырками становится неприменимо. Отметим, что для концентраций вблизи равновесной рекомбинация ШРХ останется доминирующим процессом даже при уменьшении концентрации вакансий ртути на порядок. В то же время известно, что в процессе высокотемпературных отжигов возможно увеличение концентрации вакансий вплоть до значений при-

мерно $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [28], что теоретически позволяет уменьшить времена рекомбинации ШРХ до примерно 10 пс. Последнее представляет интерес для гетеродинных приемников, где обеспечение эффективного смешения накладывает достаточно жесткие требования на быстрдействие смесителей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе для различных значений температуры и концентрации носителей в зонах рассчитаны времена захвата электронов и дырок на состояния частично ионизованной вакансии ртути в твердых растворах HgCdTe с шириной запрещенной зоны около 40 мэВ. Показано, что времена переходов электронов на состояния вакансии из зоны проводимости не менее чем на три порядка превышают характерное время захвата дырок. Таким образом, время рекомбинации ШРХ определяется временем захвата электронов на акцепторные состояния. Сравнение темпов различных механизмов рекомбинации показывает, что процесс ШРХ определяет общее время жизни носителей в HgCdTe p -типа с концентрацией вакансий ртути более приблизительно $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ как при температуре жидкого гелия, так и при температуре жидкого азота. Полученные результаты создают предпосылки для управления временем фотоотклика в таких материалах, в том числе в суб-наносекундном диапазоне, путем изменения концентрации вакансий ртути.

Благодарности. Авторы благодарят Е.В. Андронову за помощь в разработке программного обеспечения, использованного в настоящей работе.

Финансирование. Работа поддержана грантами Российского научного фонда 22-12-00298 (расчет времен захвата электронов и дырок на изолированный акцепторный центр) и Российского фонда фундаментальных исследований 21-52-12020 (расчеты времен жизни носителей для различных процессов рекомбинации).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Число захватов электронов одним акцепторным центром равно τ_{ph}^{-1} , тогда изменение числа электронов (n) в зоне проводимости в единицу времени имеет вид

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{1}{\tau_{ph}} N_{A_2^{-1}}, \quad (13)$$

здесь $N_{A_2^{-1}}$ — число центров захвата электронов (A_2^{-1} -центров).

Формулу (13) приведем к виду

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{1}{\tau_{SRH}}n, \quad (14)$$

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{N_{A_2^{-1}}}{n\tau_{ph}}n. \quad (15)$$

Получаем

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2^{-1}}} \right). \quad (16)$$

ЛИТЕРАТУРА

- W. Lei, J. Antoszewski, and L. Faraone, *Appl. Phys. Rev.* **2**, 041303 (2015).
- K. Jóźwikowski, M. Kopytko, and A. Rogalski, *J. Appl. Phys.* **112**, 033718 (2012).
- F. Gemain, I.C. Robin, M. De Vita et al., *Appl. Phys. Lett.* **98**, 131901 (2011).
- B. Li, Y. Gui, Z. Chen et al., *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1538 (1998).
- T. Sasaki, N. Oda, M. Kawano et al., *J. Crystal Growth.* **117**, 222 (1992).
- В. В. Румянцев, М. А. Фадеев, С. В. Морозов и др., *Физика и техника полупроводников* **50**, 1679 (2016).
- M. G. Wolfire and A. Konigl, *The Astrophys. J.* **383**, 205 (1991).
- K. D. Mynbaev, A. V. Shilyaev, N. L. Bazhenov et al., *Semiconductors.* **49**, 367 (2015).
- F. Gemain, I. C. Robin, S. Brochen et al., *J. Electr. Materials.* **41**, 2867 (2012).
- X. Zhang, J. Shao, L. Chen et al., *J. Appl. Phys.* **110**, 043503 (2011).
- X. Chen, M. Wang, L. Zhu et al., *Appl. Phys. Lett.* **123** (2023).
- A. Ikonnikov, V. Rumyantsev, M. Sotnichuk et al., *Semiconductor Science and Technology* **38**, 085003 (2023).
- V. V. Rumyantsev, D. V. Kozlov, S. V. Morozov et al., *Semiconductor Science and Technology* **32**, 095007 (2017).
- В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).
- O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*, Springer-Verlag, New York (2003).
- D. N. Talwar and M. Vandevyver, *J. Appl. Phys.* **56**, 1601 (1984).
- Д. В. Козлов, М. С. Жолудев, К. А. Мажукина и др., *Физика и техника полупроводников* **57**, 432 (2023).
- В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников* Наука, Москва (1977).
- V. S. Varavin, V. V. Vasiliev, S. A. Dvoretzky et al., *Proc. SPIE.* **5136**, 381 (2003).
- S. Krishnamurthy, M. A. Berding, and Z. G. Yu, *J. Electron. Materials* **35**, 1369 (2006).
- E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth et al., *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
- S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, M. S. Zholudev et al., *ACS Photonics* **8**, 3526 (2021).
- A. R. Beattie and P. T. Landsberg, *Proc. of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **249**, 16 (1959).
- Н. Л. Баженов, К. Д. Мынбаев, Г. Г. Зегря, *Физика и техника полупроводников* **49**, 444 (2015).
- V. V. Rumyantsev, S. V. Morozov, A. V. Antonov et al., *Semiconductor Science and Technology* **28**, 125007 (2013).
- Д. В. Козлов, М. С. Жолудев, В. В. Румянцев и др., *Физика и техника полупроводников* **56**, 465 (2022).
- П. А. Бахтин, С. А. Дворецкий, В. С. Варавин и др., *Физика и техника полупроводников* **38**, 1207 (2004).
- D. Chandra, H. F. Schaake, J. H. Tregilgas et al., *J. Electronic Materials* **29**, 729731 (2000).

НЕЛИНЕЙНЫЕ КОЛЕБАНИЯ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ В РАМКАХ МАЛОМОДОВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

О. О. Некрасов^{}, Н. Н. Картавык^{**}*

*Пермский государственный национальный исследовательский университет
614068, Пермь, Россия*

Поступила в редакцию 30 января 2023 г.,
после переработки 25 февраля 2024 г.
Принята к публикации 25 февраля 2024 г.

Исследуется плоский горизонтальный бесконечный слой вязкой несжимаемой слабопроводящей жидкости, помещенный в гравитационное и переменное электрическое поля, слой нагревается на верхней границе. Для решения задачи используется восьмимодовая модель электроконвекции (расширенная модель Лоренца). Задача решается численно. В результате анализа линейной устойчивости системы для различных периодов внешнего электрического поля получены критические волновое число и электрическое число Рэлея. В случае нелинейной эволюции системы получены бифуркационные диаграммы: зависимости безразмерного теплотокота от амплитуды колебаний внешнего электрического поля. Найденны различные виды отклика системы на внешнее воздействие: периодические, квазипериодические и хаотические колебания, а также гистерезисные переходы между ними и состоянием равновесия. Получена карта режимов течения жидкости.

DOI: 10.31857/S0044451024060129

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время актуальной является задача об управлении теплотокотом в сплошных средах, например, жидкостях. Возможность контролировать тепломассоперенос в жидкостях может быть использована в различных технологических приложениях: при проектировании систем эффективного отвода тепла или для управления процессами в невосомости [1–3].

Очень хорошо изучена задача о термогравитационном механизме генерации конвекции, когда движение в неоднородно нагретой жидкости возникает за счет действия силы плавучести [4]. При этом жидкость может обладать рядом других физических свойств, например, являться носителем свободного заряда. В этом случае появляется дополнительный способ управления конвективным движением за счет воздействия на жидкость при помощи наложения внешнего электрического поля [5, 6]. Из-

вестно, что такое воздействие может привести к изменению порогов возникновения конвекции [6–9], к генерации колебательных [10] и хаотических [11] режимов движения.

В данной статье рассматривается случай взаимодействия двух механизмов возникновения конвекции: термогравитационного и электрокондуктивного [6, 9], связанного с неоднородным распределением электропроводности.

Существует множество подходов к изучению динамики нелинейных систем, большая часть которых сводится к применению численных методов. Основная сложность связана с отсутствием аналитических решений общего вида системы уравнений Навье–Стокса, описывающей поведение вязкой жидкости.

В середине XX века Э. Лоренц продемонстрировал новый способ численного моделирования уравнений Навье–Стокса, основанный на исследовании амплитуд разложения полей системы по малому набору базисных функций [12]. В этой модели конвекции в качестве фазовых переменных выступают зависящие от времени амплитуды пространственных базисных тригонометрических функций (моды), од-

^{*} E-mail: dakeln2@gmail.com

^{**} E-mail: kartavykh@psu.ru

на для поля скорости и две для температуры.

Такой подход позволил обнаружить новые важные закономерности в поведении динамических систем и привел к созданию нового раздела физики — теории динамического хаоса [13]. Несмотря на интенсивное применение численных моделей и коммерческих вычислительных пакетов, маломодовые системы по-прежнему используются для анализа нелинейной эволюции течений в различных жидкостях [14–17], в том числе начальной стадии ламинарно-турбулентного перехода [14]. Использование маломодовых моделей для теоретического описания конвекции в переменных полях показывает хорошее соответствие с экспериментами даже для больших надкритичностей [18, 19].

В данной работе для анализа электротермоконвективных течений используется модифицированная модель Лоренца, основанная на разложении полей гидродинамической системы на восемь базисных функций, отражающих симметрию задачи [10, 20]. В рамках предложенной модели изучены случаи мгновенной и конечной во времени релаксации заряда при нагреве слабопроводящей жидкости снизу в постоянном электрическом поле [20], в изотермическом случае и при сильном нагреве сверху в переменном электрическом поле [9]. В данной работе представлены результаты исследования эволюции течений слабопроводящей жидкости, возникающих в переменном электрическом поле при умеренном нагреве сверху. При этом обнаружены и проанализированы новые последовательности переходов между регулярными и хаотическими колебательными течениями.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается плоский бесконечный горизонтальный слой вязкой несжимаемой слабопроводящей жидкости толщиной h , помещенный между обкладками плоского бесконечного горизонтального конденсатора. На жидкость действует переменное электрическое поле с напряженностью \mathbf{E} , поле силы тяжести \mathbf{g} , также обкладки конденсатора нагреты до разности температур Θ . Обкладки конденсатора идеально тепло- и электропроводящие, физические условия на них выражаются при помощи следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \text{при } z = 0: \quad \hat{T} &= \Theta, \quad \Phi = \hat{U} \cos(\omega t), \\ \text{при } z = h: \quad \hat{T} &= 0, \quad \Phi = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где z — вертикальная координата, ω — частота внешнего электрического поля, \hat{U} — амплитуда изменения электрического потенциала Φ .

Под слабопроводящей понимается жидкость, имеющая электропроводность $\sigma \sim 10^{-9} - 10^{-11} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$, что позволяет использовать электрогидродинамическое приближение: в силу малости токов можно пренебречь магнитными эффектами и джоулевым нагревом [6, 7].

Система дифференциальных уравнений, описывающих систему, включает в себя уравнение Навье–Стокса, уравнение теплопроводности, закон сохранения заряда, закон Гаусса, связь между напряженностью электрического поля и его потенциалом, уравнение неразрывности [21]:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) &= -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \eta \Delta \mathbf{v} + q \mathbf{E}, \\ \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \hat{T} &= \chi \Delta \hat{T}, \\ \frac{\partial q}{\partial t} + \text{div}(\sigma \mathbf{E}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla) q &= 0, \\ \text{div} \mathbf{E} &= q / \varepsilon \varepsilon_0, \\ \mathbf{E} &= -\nabla \Phi, \\ \text{div} \mathbf{v} &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где \mathbf{v} , p , \hat{T} — поля скорости, давления и температуры соответственно, η — динамическая вязкость жидкости, ρ — плотность жидкости, χ — коэффициент температуропроводности, q — объемная плотность заряда, σ — электропроводность жидкости, ε — диэлектрическая проницаемость, ε_0 — электрическая постоянная.

Рассматриваются линейные зависимости плотности и электропроводности жидкости от температуры:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_\theta \hat{T}), \quad \sigma = \sigma_0(1 + \beta_\sigma \hat{T}),$$

см. [6, 21], где ρ_0 и σ_0 — значения плотности и электропроводности при средней температуре, β_θ и β_σ — положительные коэффициенты. Таким образом, термогравитационный и электрокондуктивный механизмы возникновения конвекции являются основными [9]. В силу малости неоднородности электропроводности (для слабопроводящей жидкости при умеренном нагреве $\beta_\sigma \hat{T} \ll 1$) можно пренебречь пространственной неоднородностью электрического поля и изменением поля, вызываемым перераспределением зарядов, т.е. использовать безындукционное приближение [20].

Система (2) приводится к безразмерному виду согласно следующим соотношениям:

$$[t] = \frac{\rho_0 h^2}{\eta}, [\Phi] = \hat{U}, [\mathbf{v}] = \frac{\chi}{\eta}, [r] = h, \tag{3}$$

$$[\hat{T}] = \Theta, E = \frac{\hat{U}}{h}, [p] = \frac{\eta\chi}{h^2}, [q] = \frac{\varepsilon\varepsilon_0\hat{U}}{h^2},$$

и с учетом приближения Буссинеска [4] ее можно записать в виде

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} =$$

$$= -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + \text{Ra}\hat{T}\mathbf{j} + \text{Ra}_\sigma q \cos(\omega t)\mathbf{j},$$

$$\text{Pr} \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\hat{T} = \Delta \hat{T}, \tag{4}$$

$$\text{Pr}_e \frac{\partial q}{\partial t} + \text{div}(\sigma \mathbf{E}) + \frac{\text{Pr}_e}{\text{Pr}}(\mathbf{v} \cdot \nabla)q = 0,$$

где \mathbf{j} — единичный вектор, сонаправленный с вертикальной осью z . Система (4) содержит следующие безразмерные параметры:

$$\text{Ra} = \frac{\rho_0 g \beta_\theta \Theta h^3}{\chi \eta}$$

— число Рэлея, характеризующее интенсивность нагрева жидкости,

$$\text{Ra}_\sigma = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon \hat{U}^2 \beta_\sigma \Theta}{\chi \eta}$$

— электрический аналог числа Рэлея, связанный с амплитудой внешнего электрического поля,

$$\text{Pr} = \frac{\eta}{\chi \rho_0}$$

— число Прандтля, отражающее соотношение между вязким и теплопроводным переносом энергии в жидкости,

$$\text{Pr}_e = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \eta}{h^2 \sigma_0 \rho_0}$$

— электрический аналог числа Прандтля, характеризующий соотношение между вязкими и электрическими силами.

3. МАЛОМОДОВАЯ МОДЕЛЬ

Представим поля \mathbf{v} , \hat{T} и q в виде $\mathbf{v}, \hat{T} = \hat{T}_0 + \theta$ и $q = q_0 + q'$, где \mathbf{v}, θ и q' — отклонения величин от

их равновесных значений (далее штрихи будут опущены). Учитывая отсутствие горизонтальной анизотропии, можно рассматривать лишь двумерные возмущения в вертикальной плоскости $x - z$, в реальности возникающие на пороге конвективной устойчивости. Введем функцию тока ψ , такую что

$$v_x = -\partial\psi/\partial z, \quad v_z = \partial\psi/\partial x,$$

см. [9], тогда система уравнений (4) переписется в виде [20]

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta\psi + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \Delta\psi - \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} \Delta\psi \right) = \Delta^2\psi +$$

$$+ \text{Ra} \frac{\partial\theta}{\partial x} + \text{Ra}_\sigma \frac{\partial q}{\partial x} \cos(\omega t),$$

$$\text{Pr} \frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial\theta}{\partial z} - \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial\theta}{\partial x} = \Delta\theta + \frac{\partial\psi}{\partial x}, \tag{5}$$

$$\text{Pr}_e \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\text{Pr}_e}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial q}{\partial z} - \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial q}{\partial x} \right) +$$

$$+ q + \frac{\partial\theta}{\partial z} \cos\omega t = 0,$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \text{при } z = 0: \quad \psi = \psi'' = \theta = 0, \\ \text{при } z = h: \quad \psi = \psi'' = \theta = 0. \end{aligned} \tag{6}$$

Для поиска решений системы уравнений (5), удовлетворяющих граничным условиям (6), применяется метод Галеркина [4] с аппроксимацией полей ψ , θ и q по минимальному набору базисных функций [9]:

$$\psi = \frac{\sqrt{2}(1+k^2)}{k} \times$$

$$\times (X(t) \sin \pi z + V(t) \sin 2\pi z) \sin \pi k x,$$

$$\Theta = \frac{\sqrt{2}}{\pi} (Y(t) \sin \pi z + W(t) \sin 2\pi z) \cos \pi k x +$$

$$+ \frac{1}{\pi} Z(t) \sin 2\pi z, \tag{7}$$

$$q = (\sqrt{2}S(t) \cos \pi z + 2\sqrt{2}T(t) \cos 2\pi z) \cos \pi k x +$$

$$+ U(t) \cos 2\pi z.$$

Здесь k — волновое число, характеризующее периодичность решений по горизонтали, а коэффициенты X, V, Y, W, Z, S, T, U — амплитуды, показывающие вклад пространственных мод в решение.

Разложения (7) содержат слагаемые разной четности по z , что связано с наличием в системе (5) производных разного порядка по z . Амплитуды $X - U$ определяются при помощи условий, выражающих ортогональность невязки уравнений системы (5) по отношению к каждой из базисных функций [4]. После перемасштабирования времени

$$t \rightarrow \frac{\text{Pr}}{\pi^2(1+k^2)}t$$

получим систему восьми обыкновенных дифференциальных уравнений для амплитуд пространственных гармоник (точка над переменной обозначает производную по времени) [9, 22]:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= \text{Pr}(-X + rY - eT \cos \omega t), \\ \dot{Y} &= -Y + X + XZ, \\ \dot{Z} &= -bZ - XY, \\ \dot{V} &= \text{Pr}(-dV + (rW + eS \cos \omega t)/d), \\ \dot{W} &= -dW + V, \\ \dot{S} &= -gS + XU - gY \cos \omega t, \\ \dot{T} &= -gT - gW \cos \omega t, \\ \dot{U} &= -gU - XS - 2gZ \cos \omega t. \end{aligned} \quad (8)$$

В системе (8) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} r &= \frac{\text{Ra}}{\text{Ra}_0}, \quad e = \frac{\text{Ra}_\sigma}{\text{Ra}_{\sigma 0}}, \\ \text{Ra}_0 &= \frac{\pi^4(1+k^2)^3}{k^2}, \quad \text{Ra}_{\sigma 0} = \frac{3\pi^4(1+k^2)^3}{8k^2}, \\ d &= \frac{4+k^2}{1+k^2}, \quad b = \frac{4}{1+k^2}, \quad g = \frac{\text{Pr}}{\pi^2(1+k^2)\text{Pr}_e}, \end{aligned} \quad (9)$$

где r, e — нормированные тепловое и электрическое числа Рэлея, Ra_0 — критическое число Рэлея, при котором начинается термогравитационная конвекция, $\text{Ra}_{\sigma 0}$ — параметр системы.

4. АНАЛИЗ ЛИНЕЙНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ

Изучается случай умеренного нагрева сверху, при котором нормированное тепловое число Рэлея r принимает отрицательное значение -1 [23]. Как видно из соотношений (9), при нагреве сверху нормированное электрическое число Рэлея e также отрицательно, но в работе рассматривалось его абсолютное значение. Прочие параметры жидкости имеют значения $\text{Pr} = 400, \text{Pr}_e = 30$. Они соответствуют слабопроводящим жидкостям, электропроводность

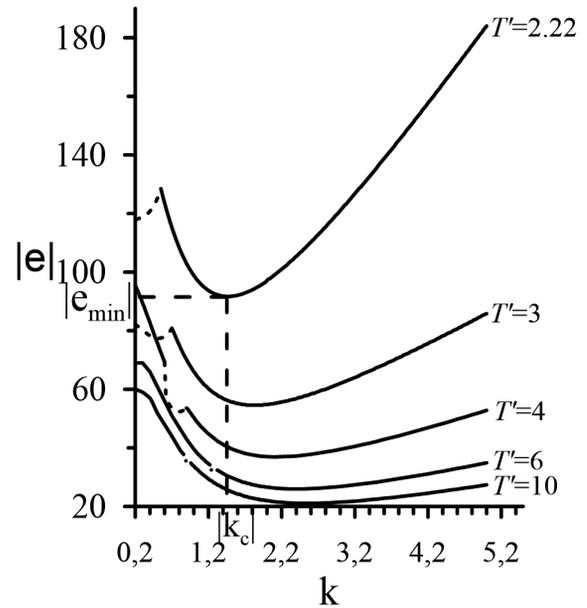


Рис. 1. Семейство нейтральных кривых в координатах волновое число k — модуль электрического параметра $|e|$ при различных периодах T' изменения внешнего электрического поля. Сплошные линии отвечают квазипериодическим режимам, пунктирные — синхронным [23]

которых зависит от температуры, например, кукурузному или трансформаторному маслу [24–26]. Реальные физические характеристики системы отвечают толщине слоя 1 см, разности потенциалов 1 кВ, разности температур $\sim 10^\circ \text{C}$.

Как видно из системы (8) с набором безразмерных параметров (9), волновое число k , соответствующее пространственному горизонтальному масштабу возмущений, остается неопределенным. Стандартным подходом для нахождения значения этого параметра является анализ линейных возмущений системы.

После линеаризации система (8) может быть представлена в матричном виде

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = A(t)\mathbf{x}(t)$$

с линейной матрицей, зависящей от времени с периодом $T' = 2\pi/\omega$. Тогда для анализа ее линейной устойчивости можно применить теорию Флоке [27], с помощью которой получены нейтральные кривые линейной устойчивости системы для различных периодов внешнего электрического поля (рис. 1) [23].

Определив точку экстремума нейтральной кривой, можно вычислить минимальное по модулю значение безразмерного электрического параметра, с которого начинается конвективное движение жидкости, а также соответствующее критическое вол-

новое число, например, $|e_{min}|(T' = 2.22) = 91.7$ и $k_c(T' = 2.22) = 1.45$. Линейный анализ устойчивости системы предсказывает возникновение квазипериодических колебаний в областях глобального минимума нейтральных кривых рис. 1. В областях локальных минимумов кривых колебания синхронны, соответствующие области построены пунктирными линиями.

5. РЕЖИМЫ НЕЛИНЕЙНОЙ КОНВЕКЦИИ

Чтобы описать интенсивность конвективных процессов, вычислялось число Нуссельта (Nu) — параметр, равный среднему по времени теплотопотку, приходящемуся на единицу горизонтальной границы конденсатора [9]. Число Нуссельта может быть выражено через амплитуду Z системы (8):

$$Nu = 1 - \frac{2}{t_{end}} \int_0^{t_{end}} Z(t) dt, \quad (10)$$

где t_{end} выбирается таким образом, чтобы в него укладывалось более сотни периодов колебаний системы.

Волновые числа k брались из результатов применения линейной теории ($k = k_c$, где k_c отвечает глобальному минимуму нейтральной кривой для выбранного периода внешнего поля). Геометрические параметры b , g и d определялись исходя из выбранного волнового числа. Значения прочих безразмерных параметров приведены в начале разд. 4.

Исследование режимов электроконвекции проводилось следующим образом: система (8) численно интегрировалась при помощи метода Рунге–Кутты четвертого порядка точности при различных значениях безразмерного нормированного электрического числа Рэлея $|e|$ и периода изменения электрического поля T' . Использовался метод продолжения по параметру: при вычислении числа Нуссельта для каждого значения $|e|$ в качестве начальных условий использовались распределения, полученные на предыдущем шаге по $|e|$. Этот метод позволяет непрерывно изменять управляющий параметр, определяя границы гистерезисных переходов [28]. Таким образом определялись зависимости $Nu(|e|)$ для различных периодов внешнего электрического поля T' , для каждого периода бралось соответствующее критическое значение волнового числа.

В ходе исследования были выделены несколько видов эволюции системы для различных периодов внешнего поля T' .

5.1. Период внешнего поля $T' = 2$

Зависимость безразмерного теплотопотока Nu от параметра $|e|$ для данного периода внешнего поля представлена на рис. 2.

При увеличении параметра $|e|$ из начальных условий, соответствующих малым возмущениям механического равновесия, конвекция возникает в виде квазипериодических колебаний в точке А рис. 2 ($|e| = 112.2$) (фурье-спектр колебаний амплитуды X содержит две или более частоты, несоизмеримых с внешней ($\nu = 0.5$, рис. 3 а)).

При дальнейшем росте параметра $|e|$ квазипериодические колебания переходят в точке В рис. 2 ($|e| = 122.7$) в специфический субгармонический режим колебаний: фурье-спектр содержит внешнюю частоту, а также частоту, вдвое меньшую внешней, и их линейные комбинации (рис. 4).

На участке ВС происходит каскад бифуркаций удвоений периодов (рис. 4), переходящий в хаос в точке С рис. 2 ($|e| = 124.7$). Хаотические колебания существуют на участке CD рис. 2 и характеризуются непрерывным фурье-спектром (рис. 3 б). В точке D рис. 2 ($|e| = 126.6$) вновь возникает режим, характеризующийся частотой, вдвое меньшей частоты внешнего поля. При дальнейшем увеличении

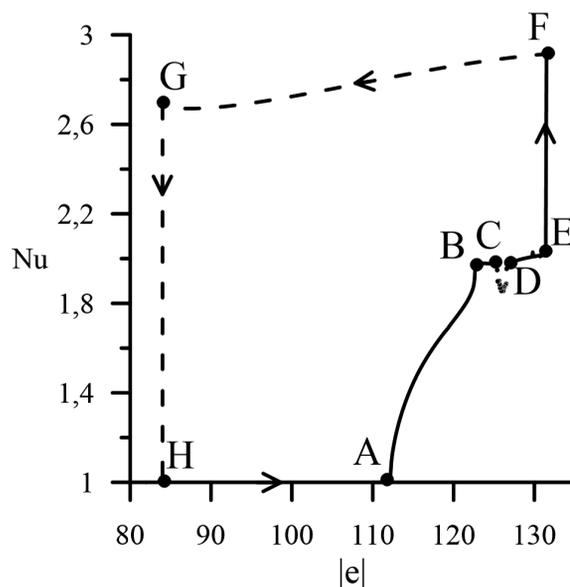


Рис. 2. Зависимость числа Нуссельта Nu от абсолютного значения безразмерного электрического параметра $|e|$ при периоде внешнего поля $T' = 2$. Сплошная линия — движение в сторону увеличения $|e|$, штриховая — в сторону уменьшения $|e|$

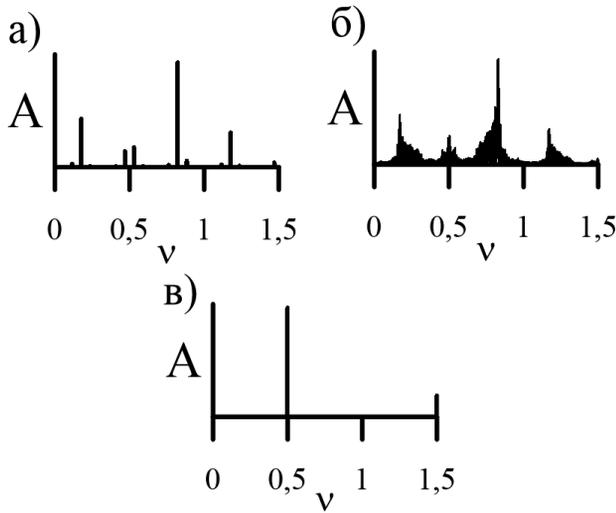


Рис. 3. Фурье-спектры колебаний амплитуды X при периоде воздействия $T' = 2$ для различных значений $|e|$. Нижняя ветвь рис. 2: а — $|e| = 120$, квазипериодический отклик; б — $|e| = 126$, хаотические колебания. Верхняя ветвь рис. 2: в — $|e| = 131$, синхронный отклик

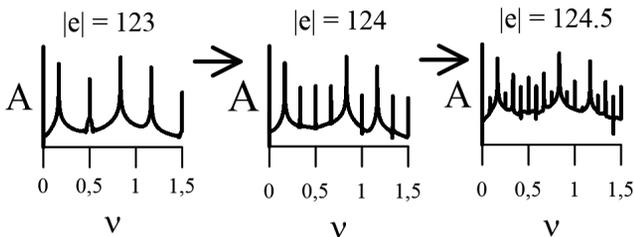


Рис. 4. Фурье-спектры колебаний амплитуды X в логарифмическом масштабе при периоде воздействия $T' = 2$. Колебания отвечают участку BC рис. 2, где происходит субгармонический каскад

$|e|$ система колеблется таким образом до точки E рис. 2 ($|e| = 131.3$), где теплопоток резко возрастает. При числах Нуссельта, больших 2.5, в слое появляются синхронные возмущения, фурье-спектры которых содержат лишь те частоты, что кратны внешней (рис. 3 в).

Если, пользуясь методом продолжения по параметру, последовательно уменьшать параметр $|e|$ из значений, лежащих правее точки F рис. 2, то переход системы от конвективного течения к механическому равновесию будет происходить иным образом, с резким уменьшением числа Нуссельта в точке G рис. 2 ($|e| = 84$). Таким образом, в системе реализуется гистерезис (петля HAFG на рис. 2), сопровождающийся скачками теплопотока.

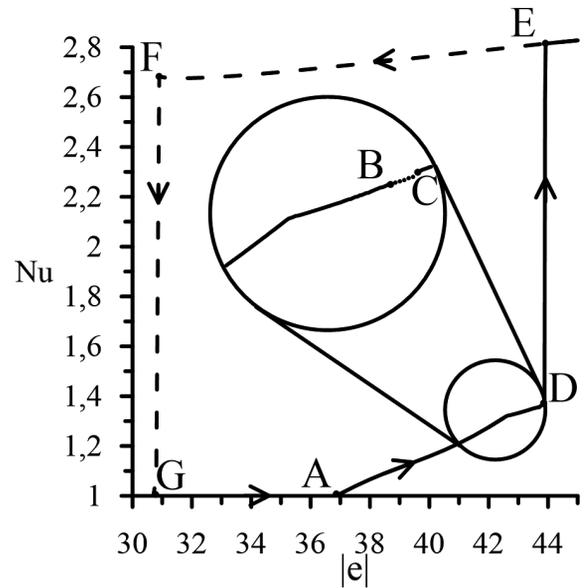


Рис. 5. Зависимость числа Нуссельта Nu от абсолютного значения безразмерного электрического параметра $|e|$ при периоде внешнего поля $T' = 4$. Сплошная линия — движение в сторону увеличения $|e|$, штриховая — в сторону уменьшения $|e|$

5.2. Период внешнего поля $T' = 4$

Зависимость безразмерного теплопотока от параметра $|e|$ для данного периода внешнего поля представлена на рис. 5.

При увеличении абсолютного значения параметра e конвекция возникает в точке A рис. 5 ($|e| = 36.9$) в виде квазипериодических колебаний. При дальнейшем увеличении $|e|$ эти колебания переходят в хаос через квазипериодичность в точке B рис. 5 ($|e| = 43.5$). Переход к хаосу через квазипериодичность сопровождается появлением в системе все большего количества линейных комбинаций частот, несоизмеримых с внешней, до тех пор, пока спектр не становится непрерывным. Хаос существует на участке BC рис. 5 (в точке C $|e| = 43.78$). На участке CD рис. 5 реализуется область синхронизации, в которой наблюдаются субгармонические колебания. Затем, в точке D рис. 5 ($|e| = 43.9$) теплопоток испытывает резкий скачок, и система переходит к синхронным колебаниям.

Аналогично предыдущему случаю наблюдается явление гистерезиса (петля ADEFG на рис. 5): одновременное сосуществование режимов с разными числами Нуссельта. При $Nu > 2.6$ реализуются синхронные колебания (участок EF на рис. 5). При уменьшении параметра $|e|$ в точке F рис. 5 ($|e| = 30.9$) система переходит к состоянию равновесия.

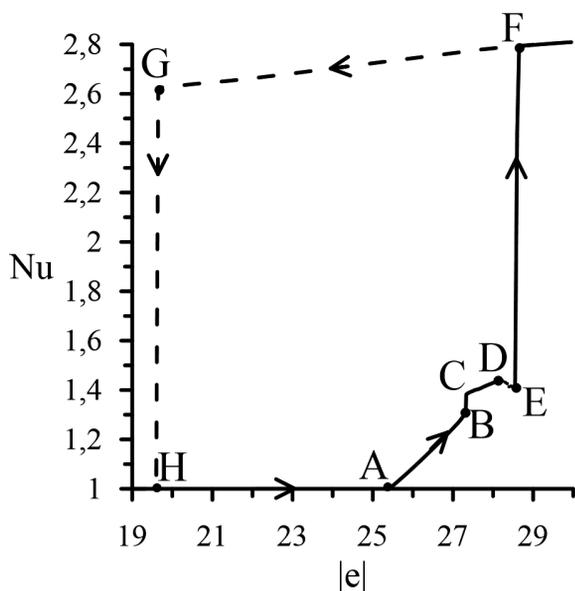


Рис. 6. Зависимость числа Нуссельта Nu от абсолютного значения безразмерного электрического параметра $|e|$ при периоде внешнего поля $T' = 6.2$. Сплошная линия — движение в сторону увеличения $|e|$, штриховая — в сторону уменьшения $|e|$

5.3. Период внешнего поля $T' = 6.2$

Зависимость безразмерного теплопотока от параметра $|e|$ для данного периода внешнего поля представлена на рис. 6.

Подобно всем предыдущим случаям, конвекция возникает в виде квазипериодических колебаний в точке А рис. 6 ($|e| = 25.4$). При увеличении параметра $|e|$ в точке В рис. 6 ($|e| = 27.3$) происходит обратная бифуркация (число Нуссельта резко возрастает для определенного значения $|e|$), и система переходит в точку С рис. 6 к колебаниям, характеризующимся частотой, втрое меньшей частоты внешнего поля. Затем происходит каскад удвоений периода, приводящий к появлению хаоса в точке D рис. 6 ($|e| = 28.2$), который существует вплоть до точки E рис. 6 ($|e| = 28.6$), где система с резким увеличением числа Нуссельта переходит к синхронным колебаниям.

При этом периоде внешнего поля также наблюдается явление гистерезиса (петля AEF GH на рис. 6). На верхней ветви этой петли FG рис. 6 реализуются синхронные колебания, при уменьшении параметра $|e|$ в точке G рис. 6 ($|e| = 19.6$) в системе резко исчезает конвекция.

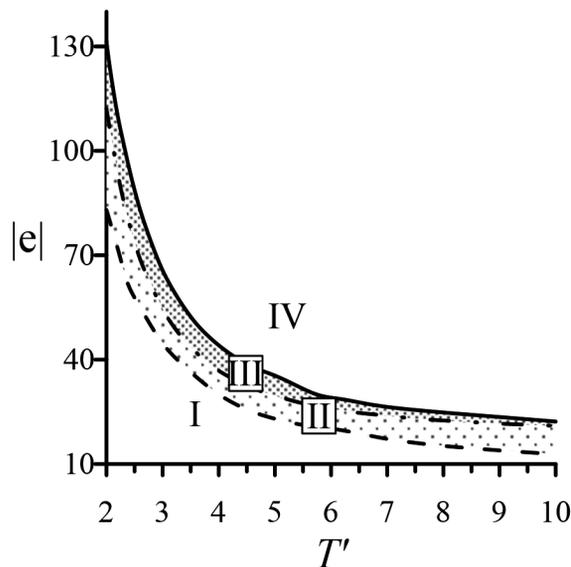


Рис. 7. Карта режимов движения жидкости на плоскости период изменения внешнего электрического поля T' — абсолютное значение электрического параметра $|e|$. I — область отсутствия конвекции; II — область сосуществования синхронных колебаний и отсутствия конвекции; III — область сосуществования синхронных колебаний и различных режимов: квазипериодических колебаний, субгармонических колебаний и хаоса; IV — область синхронных колебаний

На основании исследования зависимостей числа Нуссельта от безразмерного электрического параметра для различных периодов изменения внешнего электрического поля была построена карта режимов электроконвекции для диапазона периодов $[2; 10]$ (рис. 7).

Для всех рассмотренных периодов изменения внешнего поля неустойчивость возникает при увеличении управляющего параметра $|e|$ из состояния равновесия через квазипериодические колебания (штрихпунктирная линия на рис. 7). При дальнейшем увеличении электрического числа Рэлея малоинтенсивные квазипериодические колебания могут трансформироваться в субгармонические или хаотические режимы. С ростом электроконвективного параметра на границе, отмеченной сплошной линией на рис. 7, возникают высокоинтенсивные синхронные колебательные течения. При уменьшении управляющего параметра из областей интенсивной конвекции на границе, отмеченной штриховой линией на рис. 7, происходит переход к механическому равновесию жидкости.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задача об электроконвекции плоского горизонтального слоя вязкой несжимаемой слабопроводящей жидкости, помещенного в переменное электрическое поле и нагреваемого сверху, изучена в рамках маломодового приближения. Рассматривается случай умеренного нагрева сверху.

В результате исследования линейных возмущений при переменном внешнем воздействии получены нейтральные кривые, зависящие от периода электрического поля, определены соответствующие критические волновые числа.

В нелинейном случае изучена эволюция системы при изменении амплитуды и периода внешнего электрического поля. Обнаружены различные виды отклика системы: квазипериодический, субгармонический, характеризующийся частотой, втрое меньшей частоты внешнего воздействия, синхронный и хаос. Выявлены различные сценарии перехода к хаосу, через квазипериодичность и через субгармонический каскад.

Обнаружено явление гистерезиса. В зависимости от начальных условий колебательные течения слабопроводящей жидкости могут иметь высокую или низкую интенсивность. Высокоинтенсивный режим отвечает синхронным возмущениям. Для колебаний низкой интенсивности наблюдаются различные режимы отклика системы. Гистерезисные переходы сопровождаются бифуркациями. Предсказания линейной теории подтверждаются в нелинейном случае.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-21-00344, <https://rscf.ru/project/23-21-00344/>).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Авдуевский, И. В. Бармин, С. Д. Гришин и др., *Проблемы космического производства*, Машиностроение, Москва (1980).
2. В. И. Полежаев, А. В. Бунэ, Н. А. Вerezуб и др., *Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье – Стокса*, Наука, Москва (1987).
3. А. В. Гетлинг, *Конвекция Рэлея – Бенара: Структуры и динамика*, Эдиториал УРСС, Москва (1999).
4. Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкий, *Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости*, Наука, Москва (1972).
5. Г. А. Остроумов, *Взаимодействие электрических и гидродинамических полей: физические основы электрогидродинамики*, Наука, Москва (1979).
6. М. К. Болога, Ф. П. Гросу, И. А. Кожухарь, *Электроконвекция и теплообмен*, Штиинца, Кишинева (1977).
7. В. L. Smorodin and M. G. Verlade, *J. Electrostatics* **48**, 261 (2000).
8. В. А. Ильин, Б. Л. Смородин, *Письма в ЖТФ* **31**, 57 (2005).
9. Н. Н. Картавых, Б. Л. Смородин, В. А. Ильин, *ЖЭТФ* **148**, 178 (2015).
10. В. А. Ильин, Б. Л. Смородин, *Письма в ЖТФ* **33**, 81 (2007).
11. Б. Л. Смородин, А. В. Тараут, *ЖЭТФ* **145**, 180 (2014).
12. E. N. Lorenz, *J. Atmosph. Sci.* **20**, 130 (1963).
13. П. Берже, И. Помо, К. Видаль, *О детерминированном подходе к турбулентности*, Мир, Москва (1991).
14. Н. Б. Волков, Н. М. Зубарев, *ЖЭТФ* **107**, 1868 (1995).
15. J. Jawdat, *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **37**, 629 (2010).
16. D. Laroze, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **18**, 2436 (2013).
17. A. Srivastava and B. Bhadauria, *J. Nanofluids* **12**, 904 (2023).
18. R. Finucane and R. Kelly, *Int. J. Heat Mass Transfer* **19**, 71 (1976).
19. G. Ahlers, P. C. Hohenberg, and M. Luke, *Phys. Rev. A* **32**, 3519 (1985).
20. В. А. Ильин, *ЖТФ* **83**, 64 (2013).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. VI, *Гидродинамика*, Наука, Москва (1986).
22. В. Smorodin and N. Kartavykh, *Micrograv. Sci. Technol.* **32**, 423 (2020).

23. O. O. Nekrasov and N. N. Kartavykh, *Interfacial Phenomena and Heat Transfer* **7**, 217 (2019). *Electrophysics and Electrohydrodynamics of Liquids» (MPEEL)*, 79 (2000).
24. С. Р. Косвинцев, *Вестник Пермского университета, сер. Физика* **2**, 128 (1994).
25. С. А. Жданов, С. Р. Косвинцев, И. Ю. Макарихин, *ЖЭТФ* **117**, 398 (2000).
26. S. R. Kosvintsev, B. L. Smorodin, S. A. Zhdanov et al., *Proc. Int. Conf. «Modern Problems of*
27. Э. А. Коддингтон, Н. Левинсон, *Теория обыкновенных дифференциальных уравнений*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).
28. Е. Л. Тарунин, *Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции*, Изд-во Иркут. унив., Иркутск (1990).

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЧЕРЕНКОВСКИЕ УСИЛИТЕЛИ СУБТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА НА РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКАХ БОЛЬШОЙ ПЛОТНОСТИ

А. В. Ершов *, *И. Н. Карташов* **, *М. В. Кузелев* ***

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

Поступила в редакцию 28 ноября 2023 г.,
после переработки 25 января 2024 г.
Принята к публикации 25 января 2024 г.

Рассмотрены усилители с диэлектрическим и плазменно-диэлектрическим заполнением, основанные на возбуждении поверхностных электромагнитных волн на границе диэлектрика релятивистским электронным пучком. Основное внимание уделено субтерагерцовому диапазону рабочих частот. В линейном приближении получено дисперсионное уравнение и определены области усиливаемых частот и структуры поля. Выделены два предельных режима черенковской пучковой неустойчивости в зависимости от плотности электронного пучка. Оценена роль плазмы вблизи границы диэлектрика. На основе решения укороченной системы нелинейных уравнений определена эффективность преобразования энергии направленного движения электронного пучка в энергию электромагнитных волн. Предложены схемы вывода излучения из рабочей области усилителя.

DOI: 10.31857/S0044451024060130

1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Начатые в 70-е годы прошлого века интенсивные теоретические и экспериментальные исследования, направленные на получение мощного когерентного электромагнитного излучения СВЧ-диапазона при помощи сильноточных электронных пучков, распространяющихся в электродинамических системах с плазменным заполнением, увенчались несомненным успехом. В настоящее время имеются действующие субгигаваттные плазменные источники электромагнитного излучения сантиметрового диапазона длин волн [1–3]. При их создании возникло новое направление прикладной физики — сильноточная релятивистская плазменная СВЧ-электроника [4], активно развивающееся и в настоящее время [5]. Поэтому совершенно естественным является желание «продвинуть» имеющиеся успехи и достижения в области СВЧ на более высокочастотную область, на-

пример, в субтерагерцовый, или даже терагерцовый диапазоны. Исследованию возможности продвижения действующих черенковских плазменных источников электромагнитного излучения в субтерагерцовый диапазон посвящена работа [6].

В настоящей работе рассматриваются черенковские излучатели на плотных релятивистских электронных пучках, использующие в качестве электродинамических систем, диэлектрические и плазменно-диэлектрические волноводы. Идея использования комбинированных плазменно-диэлектрических структур для замедления волн в черенковских излучателях рассматривалась, например, в работах [7–9]. Мы главным образом будем рассматривать взаимодействие электронного пучка с высокими модами диэлектрических волноводов, когда они относятся к типу так называемых пространственно развитых (многоволновых) электродинамических систем [10], поскольку длины волн высоких (а значит высокочастотных) мод волновода малы по сравнению с его поперечным размером.

При выполнении неравенства $c/\sqrt{\varepsilon_d} < u$, где u — скорость пучка, ε_d — проницаемость диэлектрика,

* E-mail: erшов.av17@physics.msu.ru

** E-mail: igorkartashov@mail.ru

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

достаточное замедление волн имеется и без плазмы. Этот случай и представляет основной интерес в настоящей работе. Если выполнено противоположное неравенство $c/\sqrt{\varepsilon_d} > u$, то замедление волн обеспечивается только плазмой, что здесь для нас менее интересно. Мы рассматриваем случай одновременного наличия в волноводе и диэлектрика и плазмы хотя бы потому, что в сильных высокочастотных полях на поверхности диэлектрика развивается пробой, приводящий к формированию плазмы в областях волновода, примыкающих к диэлектрику [11, 12]. Плазма существенно меняет электродинамику диэлектрического волновода, что следует учитывать в рамках обрисованной выше проблематики. По существу настоящая работа является продолжением нашей работы [6], в которой рассмотрена проблема повышения рабочей частоты излучателей с использованием только плазмы большой плотности без каких-либо диэлектрических вставок. Таким образом, в настоящей работе мы пытаемся решить ту же проблему повышения частоты, путем использования в излучателе иной электродинамической системы¹⁾.

Рассмотрим взаимодействие прямолинейного электронного пучка с волной E -типа волновода кругового поперечного сечения с радиально неоднородным изотропным заполнением средой с диэлектрической проницаемостью вида

$$\varepsilon_{ij}(\omega, r) = \varepsilon(\omega, r)\delta_{ij}, \quad i, j = r, \varphi, z, \quad (1)$$

где r, φ, z — цилиндрические координаты, а $\varepsilon(\omega, r)$ — некоторая функция радиальной координаты r (и частоты ω). Направим ось OZ вдоль оси волновода, совпадающей с направлением движения пучка, и определим азимутально-симметричную продольную составляющую напряженности электрического поля формулой

$$E_z(t, z, r) = \frac{1}{2}[E(r)\exp(-i\omega t + ik_z z) + C.C.]. \quad (2)$$

Из уравнений Максвелла с тензором диэлектрической проницаемости (1) следует уравнение для комплексной амплитуды $E(r)$ в формуле (2)

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{\varepsilon(\omega, r)}{\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr} \right) - \varepsilon(\omega, r)E = 0, \quad (3)$$

где $\chi^2(\omega, r) = k_z^2 - \varepsilon(\omega, r)\omega^2/c^2$.

Будем рассматривать два варианта заполнения волновода средой. При первом варианте

$$\varepsilon(\omega, r) = \begin{cases} \varepsilon_d, & 0 < r < r_0, \\ \varepsilon_p = 1 - \omega_p^2/\omega^2, & r_0 < r < R, \end{cases} \quad (4)$$

где ω_p — постоянная электронная ленгмюровская частота. Согласно (4) во внутренней области волновода $r < r_0$ расположен диэлектрик с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_d > 1$, а во внешней области — холодная электронная бесстолкновительная плазма. Этот вариант заполнения волновода будем называть случаем прямой геометрии. При втором варианте заполнения, называемом случаем инверсной геометрии,

$$\varepsilon(\omega, r) = \begin{cases} \varepsilon_p = 1 - \omega_p^2/\omega^2, & 0 < r < r_0, \\ \varepsilon_d, & r_0 < r < R, \end{cases} \quad (5)$$

т. е. внутренняя область волновода заполнена плазмой.

Как видно из формул (1), (4) и (5), плазма, находящаяся в волноводе с диэлектрической вставкой, является немагнитной. В упомянутых выше работах [7–9] рассматривался противоположный случай — полностью замагнитенной плазмы. Ниже будет показано, что случаи плазмы без внешнего магнитного поля и плазмы в бесконечно сильном внешнем магнитном поле существенно отличаются друг от друга. Дело здесь в разном наборе собственных волн плазменно-диэлектрических волноводов.

Непосредственно из уравнения (3) получаются следующие граничные условия на границе раздела диэлектрика с плазмой:

$$\{E\}_{r=r_0} = 0, \quad \left\{ \frac{\varepsilon(\omega, r)}{\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr} \right\}_{r=r_0} = 0. \quad (6)$$

Здесь и далее фигурные скобки означают разность выражений по обе стороны от границы, то есть, например, $\{E\}_{r=r_0} = E(r_0 + 0) - E(r_0 - 0)$. Еще одно граничное условие $E(R) = 0$ записывается на идеально проводящей границе волновода.

Как видно из (1) среда в волноводе изотропна, что применительно к плазме означает ее немагнитность. Однако в любом из известных черенковских плазменных излучателей обязательно имеется некоторое внешнее магнитное поле, необходимое для получения и транспортировки сильноточного релятивистского электронного пучка. Немагнитность плазмы предполагает выполнение неравенств [14]

$$\Omega_e^2 \ll \omega^2, \quad \Omega_e \omega_p^2 \ll \omega^3, \quad (7)$$

¹⁾ Усиление волн в диэлектрических волноводах без плазмы в низкочастотном диапазоне рассматривалось в работе [13].

где Ω_e — электронная циклотронная частота. В настоящей работе нас интересует только область достаточно высоких частот, поэтому неравенства (7) считаем безусловно выполненными. Иначе обстоит дело с электронным пучком. Плотности используемых в плазменных излучателях электронных пучков малы по сравнению с плотностями плазмы. Поэтому, предполагая выполненными неравенства [7, 14]

$$\Omega_e^2 \gg \omega_b^2 \gamma^{-3}, |\delta k u|^2 \quad (8)$$

электронный пучок считаем полностью замагниченным. Кроме того, следуя условиям экспериментов используем модель бесконечно тонкого трубчатого электронного пучка. Здесь ω_b — ленгмюровская частота электронов пучка, $\gamma = (1 - u^2/c^2)^{-1/2}$, δ_b — толщина трубчатого пучка, а δk — пространственный инкремент (коэффициент усиления) резонансной черенковской пучковой неустойчивости.

Плотность тока бесконечно тонкого трубчатого замагниченного электронного пучка определим формулой

$$j_z(t, z, r) = \delta_b \delta(r - r_b) j_b(t, z; r_b), \quad (9)$$

где $j_b(t, z; r_b)$ — функция, для нахождения которой требуются уравнения динамики пучка, а параметрическая зависимость от радиуса трубчатого пучка r_b указывает на то, что на электроны тонкого пучка действует поле (2) именно в точке $r = r_b$. Наличие в волноводе тока с плотностью (9) приводит к следующему скачку азимутальной составляющей индукции магнитного поля

$$\{B_\varphi(t, z, r)\}_{r=r_b} = \frac{4\pi}{c} \delta_b j_b(t, z; r_b). \quad (10)$$

Азимутальная составляющая индукции магнитного поля определяется формулой вида (2) с комплексной амплитудой

$$B(r) = -i\varepsilon(\omega, r) \frac{\omega}{c\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr}. \quad (11)$$

Подставляя формулу вида (2) с комплексной амплитудой (11) в (10) и считая, что электронный пучок проходит по одной из плазменных областей волновода, находим следующие граничные условия для функции $E(r)$ на электронном пучке:

$$\{E\}_{r=r_b} = 0, \quad \left\{ \frac{dE}{dr} \right\}_{r=r_b} = \delta_b \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} \frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (12)$$

где

$$\langle j_b(r_b) \rangle = \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} j_b(t, z; r_b) \exp(i\omega t - ik_z z) dt \quad (13)$$

— пространственно-временная Фурье-гармоника плотности тока пучка, а $\chi_p^2 = k_z^2 - \varepsilon_p \omega^2/c^2$. В (12) добавлено очевидное условие непрерывности на электронном пучке самой функции $E(r)$. В линейном приближении для вычисления функции (13) можно воспользоваться известным выражением для проводимости пучка электронов, полученным в гидродинамической модели [7, 14], что дает

$$\frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle = -\frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2} E(r_b). \quad (14)$$

Процедура вычисления функции (14) в нелинейной теории будет описана ниже.

2. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ДЛЯ СЛУЧАЯ ПРЯМОЙ ГЕОМЕТРИИ

Приступим теперь к рассмотрению волновода в случае прямой геометрии (4). Поскольку пучок проходит по плазменной области волновода считаем, что $r_0 < r_b < R$. Учитывая граничные условия при $r = r_0$ и $r = R$, решение уравнения (3) в разных областях волновода запишем в виде

$$E(r) = \begin{cases} AI_0(\chi_d r), & r < r_0, \\ A\chi_p r_0 [UI_0(\chi_p r) + VK_0(\chi_p r)], & r_0 < r < r_b, \\ BF_0(\chi_p r), & r_b < r < R, \end{cases} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} V(\omega, k_z) &= I_0(\chi_d r_0) I_1(\chi_p r_0) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon_d \chi_p}{\varepsilon_p \chi_d} I_1(\chi_d r_0) I_0(\chi_p r_0), \\ U(\omega, k_z) &= I_0(\chi_d r_0) K_1(\chi_p r_0) + \\ &\quad + \frac{\varepsilon_d \chi_p}{\varepsilon_p \chi_d} I_1(\chi_d r_0) K_0(\chi_p r_0), \end{aligned} \quad (16)$$

$$F_0(\chi_p r) = K_0(\chi_p r) - I_0(\chi_p r) \frac{K_0(\chi_p R)}{I_0(\chi_p R)},$$

A и B — постоянные, $I_0(x)$ и $K_0(x)$ — функции Инфелда и Макдональда, а $\chi_d^2 = k_z^2 - \varepsilon_d \omega^2/c^2$. Подставляя решения (15) в граничные условия (12), получаем следующие соотношения:

$$A = B \frac{F_0(\chi_p r_b)}{\chi_p r_0 I_0(\chi_p r_b) D_0(\omega, k_z; r_b)}, \quad (17)$$

$$D_0(\omega, k_z; R) B =$$

$$= -D_0(\omega, k_z; r_b) I_0(\chi_p r_b) \delta_b r_b \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} \frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (18)$$

где

$$D_0(\omega, k_z; x) = U(\omega, k_z) + V(\omega, k_z)K_0(\chi_p x)/I_0(\chi_p x). \quad (19)$$

Соотношение (17) согласно формуле (15) определяет структуру поля волны, возбуждаемой электронным пучком в плазменно-диэлектрическом волноводе. Основным конечно является соотношение (18) которое можно трактовать как уравнение возбуждения пучком волновода (см. далее). Несложно видеть, что уравнение

$$D_0(\omega, k_z; R) = 0 \quad (20)$$

является дисперсионным уравнением, определяющим частоты собственных волн плазменно-диэлектрического волновода без пучка. Действительно, в отсутствие пучка (например, при $\delta_b = 0$) уравнение (18) имеет нетривиальное решение $B \neq 0$ только при $D_0(\omega, k_z; R) = 0$.

В линейном приближении, используя формулы (14) и (15), из (18) получаем следующее дисперсионное уравнение для определения комплексных спектров плазменно-диэлектрического волновода с тонким трубчатым прямолинейным электронным пучком в случае прямой геометрии:

$$D_0(\omega, k_z; R) - \frac{\delta_b r_b}{R^2} W_0(\omega, k_z) \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2} = 0, \quad (21)$$

где

$$W_0(\omega, k_z) = R^2 \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} D_0(\omega, k_z; r_b) I_0(\chi_p r_b) F_0(\chi_p r_b). \quad (22)$$

Если длины волн, возбуждаемых электронным пучком, малы по сравнению с радиусом волновода ($c/\omega \ll R$), что как раз и имеет место для высоких мод, то дисперсионное уравнение (20) существенно упрощается. Действительно, переходя в (19) к пределу $x \rightarrow \infty$, получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$D_0(\omega, k_z; \infty) = U(\omega, k_z) = 0. \quad (23)$$

3. УСИЛЕНИЕ ВОЛН В ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ В РЕЖИМЕ ОДНОЧАСТИЧНОГО ВЫНУЖДЕННОГО ЭФФЕКТА ЧЕРЕНКОВА. СЛУЧАЙ ПРЯМОЙ ГЕОМЕТРИИ

Исследуем пространственное усиление волн в плазменно-диэлектрическом волноводе с пучком в

случае прямой геометрии, для чего будем решать уравнение (21) относительно комплексного волнового числа $k_z(\omega)$ при вещественной частоте ω . Полагая, как это обычно делается при черенковском взаимодействии пучков с волнами любой природы [7]

$$k_z = k_{z\omega} + \delta k, \quad |\delta k| \ll k_{z\omega}, \quad (24)$$

где $k_{z\omega} = \omega/u$, преобразуем уравнение (21) к кубическому уравнению для комплексного коэффициента усиления δk

$$\left(D_0(\omega, k_{z\omega}; R) + \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega}; R)}{\partial k_{z\omega}} \delta k \right) \delta k^2 = \frac{\delta_b r_b}{R^2} \left(W_0(\omega, k_{z\omega}) + \frac{\partial W_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \delta k \right) \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{u^2}. \quad (25)$$

Пусть выполнено условие одночастичного черенковского резонанса (т.е. волна находится в черенковском резонансе с электроном), а поэтому

$$D_0(\omega, k_{z\omega}; R) = 0, \quad (26)$$

и плотность пучка настолько мала, что вторым слагаемым в скобке в правой части дисперсионного уравнения (25) можно пренебречь. Тогда, для комплексного коэффициента усиления на частоте одночастичного черенковского резонанса получаем следующее выражение:

$$\delta k(\omega_0) = \frac{1 - i\sqrt{3}}{2} \frac{\omega_0}{u} \left| \frac{\delta_b r_b}{R^2} \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{\omega_0^2} \times \right. \\ \left. \times W_0(\omega_0, k_0) \left(k_0 \frac{\partial D_0(\omega_0, k_0; R)}{\partial k_0} \right)^{-1} \right|^{1/3}, \quad (27)$$

где ω_0 — решение уравнения (26), а $k_0 = \omega_0/u$. Коэффициент усиления (27) имеет обычную для любого одночастичного вынужденного эффекта Черенкова структуру. Условием применимости решения (27), т.е. условием одночастичности усиления является неравенство

$$\left| \frac{1}{W_0(\omega_0, k_0)} \frac{\partial W_0(\omega_0, k_0)}{\partial k_0} \delta k(\omega_0) \right| \ll 1. \quad (28)$$

Для определения резонансных частот ω_0 следует решить относительно частоты ω уравнение (26). Нагляднее всего частоты ω_0 представить на дисперсионной диаграмме (рис. 1), на которой изображены дисперсионные кривые — решения дисперсионного уравнения (20), прямая $\omega = k_z c/\sqrt{\varepsilon_d}$ (нижняя штриховая линия) и прямая $\omega = k_z u$ (верхняя штриховая линия). Частоты ω_0 даются точками пересечения дисперсионных кривых с прямой $\omega = k_z u$. Расчет проделан для системы со следующими параметрами: $\omega_p = 2 \cdot 10^{11}$ рад/с, $r_0 = 1$ см, $R = 3$ см, $\varepsilon_d = 3$,

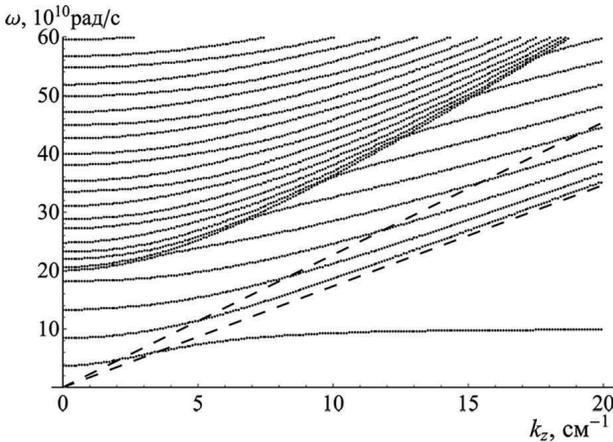


Рис. 1. Характерные дисперсионные кривые плазменно-диэлектрического волновода и прямые $\omega = k_z c / \sqrt{\epsilon_d}$ (нижняя штриховая линия) и $\omega = k_z u$ (верхняя штриховая линия)

$u = 2.27 \cdot 10^{10}$ см/с. На рисунке видны резонансы только с шестью нижними модами (хотя резонанс есть на сколь угодно высокой моде), первая из которых — плазменная.

Обратим внимание, на самую нижнюю дисперсионную кривую на рис. 1 — она соответствует поверхностной плазменной волне²⁾. Как видим, частота отсечки этой волны не равна нулю, что свойственно только для волновода с плазменным заполнением во внешней области [15], что как раз и имеет место в случае прямой геометрии. Поэтому черенковский резонанс электронного пучка с такой поверхностной плазменной волной есть всегда, что необходимо учитывать при разработке черенковских диэлектрических усилителей с внутренней диэлектрической вставкой. Действительно, при большой мощности усиливаемого сигнала, возникающая из-за пробоя плазма, кардинально изменяет электродинамические свойства системы — появляется неустойчивость на низкочастотной поверхностной плазменной волне, могущая подавить усиление в высокочастотной области.

4. РЕЖИМ КОЛЛЕКТИВНОГО ВИНУЖДЕННОГО ЭФФЕКТА ЧЕРЕНКОВА

В принципе уравнение (21) описывает и коллективный вынужденный эффект Черенкова [7, 16]. Чтобы разобраться в этом вопросе, следует уравнение (21) записать так, чтобы в явном виде выделить

²⁾ Термин «поверхностная волна» относится только к области частот $\omega < k_z c$.

дисперсионную функцию волновода без пучка (она уже выделена) и дисперсионную функцию ленгмюровских волн пучка, что несложно проделать, используя выражения (19) и (22). В результате уравнение (21) преобразуется к виду

$$D_0(\omega, k_z; R) D_b(\omega, k_z) = \delta_b r_b \frac{\chi_p^2}{\epsilon_p} \omega_b^2 \gamma^{-3} \theta(\omega, k_z), \quad (29)$$

где

$$D_b(\omega, k_z) = (\omega - k_z u)^2 - \Omega_b^2(\omega, k_z) / \epsilon_p \quad (30)$$

и есть упомянутая выше дисперсионная функция ленгмюровских волн пучка, где

$$\begin{aligned} \Omega_b^2(\omega, k_z) &= \delta_b r_b \chi_p^2 \omega_b^2 \gamma^{-3} I_0^2(\chi_p r_b) \times \\ &\times \left(\frac{K_0(\chi_p r_b)}{I_0(\chi_p r_b)} - \frac{K_0(\chi_p R)}{I_0(\chi_p R)} \right), \\ \theta(\omega, k_z) &= V(\omega, k_z) I_0^2(\chi_p r_b) \times \\ &\times \left(\frac{K_0(\chi_p r_b)}{I_0(\chi_p r_b)} - \frac{K_0(\chi_p R)}{I_0(\chi_p R)} \right)^2. \end{aligned} \quad (31)$$

Дисперсионное уравнение, определяющее частоты ленгмюровских волн (волн плотности заряда) тонкого трубчатого замагниченного электронного пучка в плазменном волноводе без диэлектрического цилиндра есть $D_b(\omega, k_z) = 0$. Левая часть дисперсионного уравнения (29) записана в «канонической» форме уравнения связанных волн — волн диэлектрического цилиндра в плазме и волн трубчатого пучка в плазме. Коэффициент связи волн содержится в величине $\theta(\omega, k_z)$.

При выполнении неравенства $\Omega_b^2 \ll \omega^2 \sim |k_z u|^2$ спектр медленной волны плотности заряда пучка можно определить формулой³⁾

$$k_z^b(\omega) = k_{z\omega} \left(1 + \frac{\Omega_b(\omega, k_{z\omega})}{\omega \sqrt{\epsilon_p}} \right). \quad (32)$$

Частота резонанса ω_0^b какой-то из волн плазменно-диэлектрического волновода и медленной волны пучка определяется из уравнения $D_0(\omega, k_z^b(\omega); R) = 0$. На резонансной частоте решение уравнения (29) ищется в виде

$$k_z(\omega_0^b) = k_0^b + \delta k, \quad (33)$$

где $k_0^b = k_z^b(\omega_0^b)$. Подставляя (33) в уравнение (29), находим следующее выражение для резонансного

³⁾ Как известно, неустойчивость и усиление имеют место только при резонансе плазменной волны с медленной волной пучка [16].

коэффициента усиления в режиме коллективного вынужденного эффекта Черенкова:

$$\delta k(\omega_0^b) = -i \left| \frac{1}{2} \delta_b r_b \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{u \Omega_b(\omega_0^b, k_0^b)} \times \theta(\omega_0^b, k_0^b) \left(\frac{\partial U(\omega_0^b, k_0^b)}{\partial k_0^b} \right)^{-1} \right|^{1/2}. \quad (34)$$

Условием применимости решения (34), т. е. условием коллективности усиления является неравенство⁴⁾

$$|\delta k(\omega_0^b) u| \ll \Omega_b(\omega_0^b, k_0^b). \quad (35)$$

5. КОЭФФИЦИЕНТЫ УСИЛЕНИЯ ВОЛН ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ ДЛЯ СЛУЧАЯ ПРЯМОЙ ГЕОМЕТРИИ ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВОЛНОВОДА

Рассмотрим теперь результаты расчета коэффициентов усиления волн в волноводе со следующими параметрами: радиус волновода $R = 3$ см, радиус диэлектрического цилиндра $r_0 = 1$ см, диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_d = 3$. Параметры пучка возьмем следующие: скорость $u = 2.27 \cdot 10^{10}$ см/с, ленгмюровская частота $\omega_b = 2.5 \cdot 10^{10}$ рад/с, средний радиус $r_b = 1.05$ см, толщина $\delta_b = 0.1$ см (ток такого пучка порядка 1 кА). Для случая, когда плазмы в волноводе нет, зависимость коэффициента усиления от частоты представлена на рис. 2.

Видно большое число зон усиления, каждая из которых соответствует черенковскому взаимодействию пучка с какой-то из мод волновода — от моды E_{01} до моды $E_{0,16}$. Более высокие зоны усиления, которых, если не учитывать частотную дисперсию проницаемости ε_d , бесконечно много, расположены в более высокочастотной области. Зоны усиления достаточно узкие, хотя, даже на частоте $\sim 10^{12}$ рад/с, их ширина составляет несколько единиц на 10^{10} рад/с. Кроме того, коэффициенты усиления довольно большие. Так, на частоте $\sim 10^{12}$ рад/с коэффициент усиления порядка 0.1 см^{-1} , что при длине усилителя в 35 см обеспечивает усиление по мощности в 1000 раз.

⁴⁾ Мы здесь не придаем явного вида неравенствам (28) и (35) ввиду их громоздкости. Выполнение этих неравенств проверялось нами при проведении численных расчетов. При тех плотностях и радиусах электронного пучка, которые брались при численных расчетах обычно оказывалось выполненным не сильное неравенство (28).

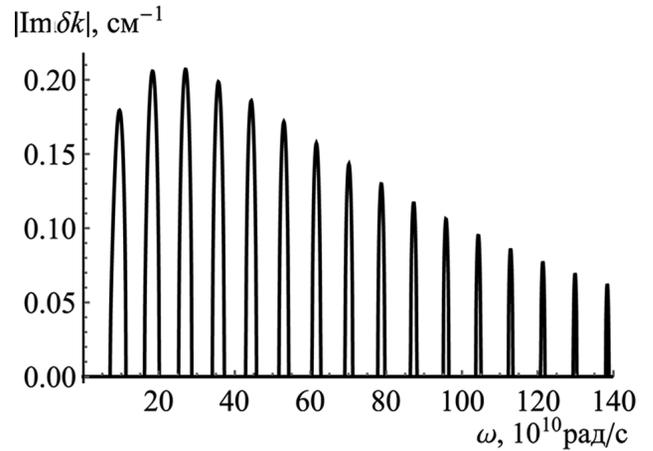


Рис. 2. Зависимость коэффициента усиления от частоты в диэлектрическом волноводе без плазмы

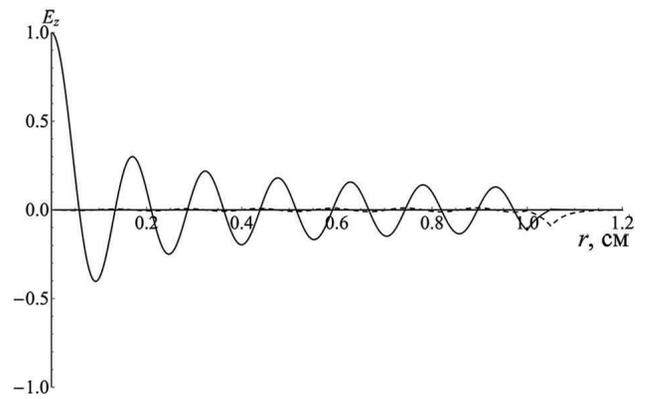


Рис. 3. Продольная компонента напряженности электрического поля моды $E_{0,13}$ при ее резонансном возбуждении электронным пучком: $\text{Re } E_z$ — сплошная линия, $\text{Im } E_z$ — штриховая линия

Следует заметить, что результаты, представленные на рис. 2 получены для случая, когда внутренняя граница электронного пучка $r_b - \delta_b/2$ совпадает с границей диэлектрика r_0 . При удалении пучка от границы диэлектрика из-за сильного затухания поля волны в вакуумной области коэффициент усиления резко падает. Это обстоятельство составляет одну из основных трудностей для использования уже реализованных черенковских СВЧ-излучателей в области более высоких частот. На рис. 3 представлены вещественная и мнимая части продольной компоненты напряженности электрического поля моды $E_{0,13}$ в точке максимума коэффициента усиления ($\omega = 112.85 \cdot 10^{10}$ рад/с, $k_z = (50.46 - 0.08i) \text{ см}^{-1}$). Видно, что в вакуумной области волновода поля фактически нет, а при $r = r_b$ поле не велико.

Перейдем теперь к случаю, когда в области волновода $r \in (r_0, R)$ присутствует плазма. Наличие плазмы, как уже отмечалось выше, существенно меняет электродинамику волновода и значительно усложняет общую картину усиления волн. Чтобы лучше в этом разобраться, рассмотрим частные случаи, представляющие самостоятельный интерес. Предположим, что в области волновода $r \in (0, r_0)$ вместо диэлектрика находится та же плазма, что и при $r \in (r_0, R)$. Дисперсионное уравнение для этого случая получается, если в (21) заменить ϵ_d на ϵ_p . Несложно показать, что это уравнение сводится к $D_b(\omega, k_z) = 0$ (см. формулу (30)), что удобно переписать следующим образом:

$$1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \frac{\Omega_b^2(\omega, k_z)}{(\omega - k_z u)^2} = 0. \tag{36}$$

Если заменить $\Omega_b^2(\omega, k_z)$ на $\omega_b^2 \gamma^{-3}$, то получится дисперсионное уравнение, описывающее взаимодействие безграничного электронного пучка с безграничной изотропной плазмой [14]. Из него для комплексного волнового числа имеем

$$k_z = \frac{\omega}{u} - i \frac{\omega}{u} \sqrt{\frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{\omega_p^2 - \omega^2}}. \tag{37}$$

При $\omega < \omega_p$ формула (37) описывает пространственное усиление продольного поля при самомодуляции пучка в среде с отрицательной диэлектрической проницаемостью [17]. При $\omega = \omega_p$ коэффициент усиления (37) обращается в бесконечность, что обусловлено равенством нулю групповой скорости ленгмювской волны холодной плазмы (эффект накопления колебаний). Аналогичные процессы имеют место и в волноводе. Действительно, при $\omega < \omega_p$ диэлектрическая проницаемость плазмы отрицательная, а продольная ленгмювская волна с частотой $\omega(k_z) = \omega_p$ есть и в волноводе с однородной изотропной плазмой. На рис. 4 представлен модуль мнимой части волнового числа, полученного численным решением уравнения (36) при $\omega_p = 20 \cdot 10^{10}$ рад/с (штриховая линия).

Пусть теперь плазма находится только в области $r \in (r_0, R)$, а остальную часть волновода занимает диэлектрик с проницаемостью $\epsilon_d < c^2/u^2$ (можно даже положить $\epsilon_d = 1$). При этом черенковский резонанс пучка с электромагнитными модами волновода невозможен. Но в дополнение к потенциальной ленгмювской волне $\omega = \omega_p$ из-за наличия границы плазмы $r = r_0$ в волноводе появляется непотенциальная поверхностная волна. В коротковолновом пределе частота поверхностной волны выходит на

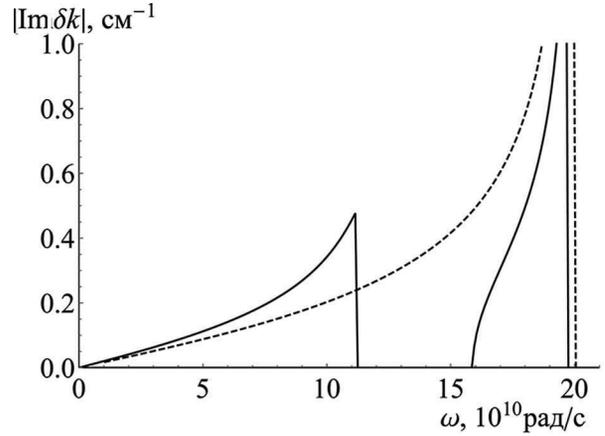


Рис. 4. Коэффициенты усиления в зависимости от частоты: однородное плазменное заполнение — штриховая линия; плазменно-диэлектрическое заполнение — сплошная линия

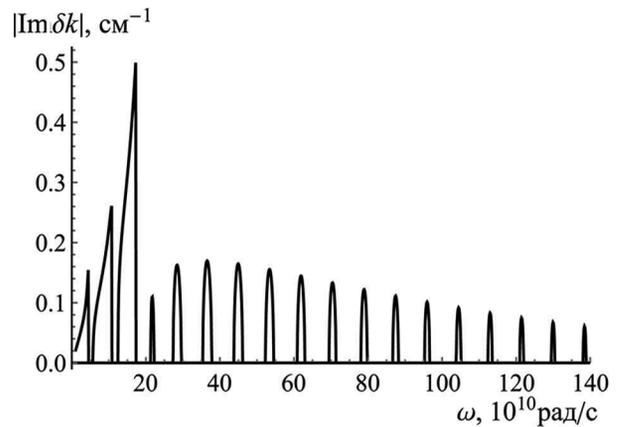


Рис. 5. Зависимость коэффициента усиления от частоты в плазменно-диэлектрическом волноводе

величину $\omega_p/\sqrt{\epsilon_d + 1}$, а при $k_z = 0$ имеется некоторая отличная от нуля частота отсечки (см. нижнюю дисперсионную кривую на рис. 1). Поэтому есть два черенковских резонанса — с объемной ленгмювской и поверхностной ленгмювской волнами. Соответственно появляются две частотные области усиления. Коэффициент усиления для этого случая на рис. 4 представлен сплошными линиями.

Пусть теперь, как и в случае рис. 2, $\epsilon_d = 3$, но еще имеется и плазма с ленгмювской частотой $20 \cdot 10^{10}$ рад/с. При этом оказываются возможны резонансы с поверхностной плазменной волной, с объемной ленгмювской волной и с электромагнитными модами. Коэффициент усиления для этого случая представлен на рис. 5, являющимся по сути комбинацией рис. 2 и 4.

Можно предположить, что присутствие в диэлектрическом волноводе с диэлектриком в области $r < r_0$ плазмы является отрицательным фактором для решения задачи повышения частоты усиливаемых волн. Действительно, при наличии плазмы в области частот, меньших плазменной частоты, коэффициенты усиления волн велики. Чем меньше частота волны, тем хуже она излучается через выходную границу усилителя. Поэтому возможно паразитное самовозбуждение усилителя в низкочастотной области, что приводит к «порче» пучка и к уменьшению эффективности черенковского излучения в высокочастотной области⁵⁾. Можно, конечно, пойти другим путем: взять плазму столь плотной, что черенковское излучение поверхностной плазменной волны придется на субтерагерцовую область. Тогда не будет необходимости в диэлектрической вставке в волновод. Этот путь имеет как свои достоинства, так и недостатки [6].

6. СЛУЧАЙ ИНВЕРСНОЙ ГЕОМЕТРИИ ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВОЛНОВОДА

Перейдем теперь к рассмотрению инверсной геометрии системы (5). Полагая $r_b < r_0$ и учитывая граничные условия при $r = r_0$ и $r = R$, решение уравнения (3) в разных областях волновода запишем в виде

$$E(r) = \begin{cases} AI_0(\chi_p r), & r < r_b, \\ B\chi_p r_0[U I_0(\chi_p r) + V K_0(\chi_p r)], & r_b < r < r_0, \\ BF_0(\chi_d r), & r_0 < r < R, \end{cases} \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} F_0(\chi_d r) &= K_0(\chi_d r) - I_0(\chi_d r) \frac{K_0(\chi_d R)}{I_0(\chi_d R)}, \\ F_1(\chi_d r) &= K_1(\chi_d r) + I_1(\chi_d r) \frac{K_0(\chi_d R)}{I_0(\chi_d R)}, \\ U(\omega, k_z) &= F_0(\chi_d r_0) K_1(\chi_p r_0) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon_d \chi_p}{\varepsilon_p \chi_d} F_1(\chi_d r_0) K_0(\chi_p r_0), \\ V(\omega, k_z) &= F_0(\chi_d r_0) I_1(\chi_p r_0) + \\ &\quad + \frac{\varepsilon_d \chi_p}{\varepsilon_p \chi_d} F_1(\chi_d r_0) I_0(\chi_p r_0). \end{aligned} \quad (39)$$

⁵⁾ Что касается коэффициентов усиления в высокочастотной области, то, как видно из рис. 2 и рис. 3, плазма на них фактически не влияет.

Подставляя решения (38) в граничные условия (12), получаем следующее соотношение:

$$B = A \times \frac{I_0(\chi_p r_b)}{\chi_p r_0 [U(\omega, k_z) I_0(\chi_p r_b) + V(\omega, k_z) K_0(\chi_p r_b)]}, \quad (40)$$

$$D_0(\omega, k_z) A = -[U(\omega, k_z) I_0(\chi_p r_b) + V(\omega, k_z) K_0(\chi_p r_b)] \times \delta_b r_b \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} \frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (41)$$

где

$$D_0(\omega, k_z) = V(\omega, k_z) \quad (42)$$

является дисперсионным уравнением, определяющим частоты собственных волн плазменно-диэлектрического волновода без пучка в случае инверсной геометрии.

В линейном приближении, используя формулы (14) и (38), из (42) получаем следующее дисперсионное уравнение для определения комплексных спектров плазменно-диэлектрического волновода с тонким трубчатым прямолинейным электронным пучком:

$$D_0(\omega, k_z) - \frac{\delta_b r_b}{R^2} W(\omega, k_z) \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2} = 0, \quad (43)$$

где

$$W(\omega, k_z) = R^2 \frac{\chi_p^2}{\varepsilon_p} \times [U(\omega, k_z) I_0(\chi_p r_b) + V(\omega, k_z) K_0(\chi_p r_b)] \times I_0(\chi_p r_b). \quad (44)$$

Уравнение (43) по виду не отличается от дисперсионного уравнения (21), поэтому его приближенное аналитическое рассмотрение мы здесь опускаем, а численные решения рассмотрим чуть позже.

Существенная особенность инверсной геометрии связана с поверхностной плазменной волной. В случае плазмы, локализованной во внутренней области волновода $r < r_0$ частота отсечки поверхностной плазменной волны равна нулю. Используя формулы (39) и (42) несложно показать, что в длинноволновом пределе частота поверхностной плазменной волны определяется формулой

$$\omega = \frac{k_z c}{\sqrt{\varepsilon_d}} \left(1 + \frac{I_1(\omega_p r_0 / c)}{I_0(\omega_p r_0 / c)} \frac{\omega_p r_0}{c} \ln \frac{R}{r_0} \right)^{-1/2}. \quad (45)$$

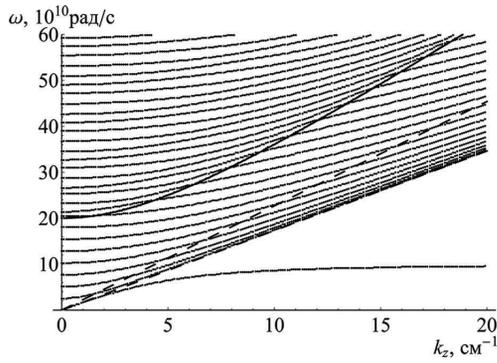


Рис. 6. Характерные дисперсионные кривые плазменно-диэлектрического волновода в случае инверсной геометрии и прямые $\omega = k_z c / \sqrt{\epsilon_d}$ (нижняя штриховая линия) и $\omega = k_z u$ (верхняя штриховая линия)

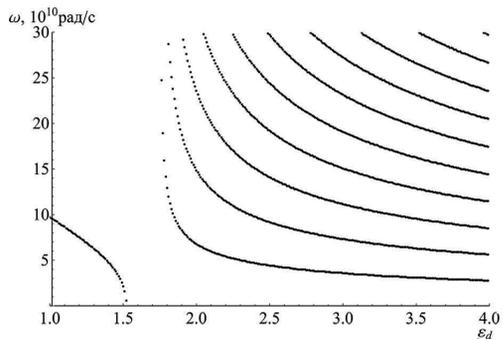


Рис. 7. Черенковские резонансы в зависимости от диэлектрической проницаемости

Учитывая, что в длинноволновом пределе фазовая скорость поверхностной плазменной волны максимальна, из (45) видим, что при $u > c / \sqrt{\epsilon_d}$ поверхностная плазменная волна возбуждаться не может. В принципе она может возбуждаться, но только при выполнении обратного неравенства $u < c / \sqrt{\epsilon_d}$, когда черенковский резонанс пучка и электромагнитных волн отсутствует. Для данной работы случай $u < c / \sqrt{\epsilon_d}$, т. е. слабого замедления электромагнитных волн, интереса не представляет (в отличие от работы [6], в которой замедление электромагнитных волн вообще отсутствует).

Рисунок 6, являющийся аналогом рис. 1, иллюстрирует резонансные частоты ω_0 в случае инверсной геометрии плазменно-диэлектрического волновода при тех же параметрах, что и в случае рис. 1⁶⁾. Поверхностная плазменная волна при этом не воз-

⁶⁾ Уравнение (42) имеет вырожденное решение $\chi_p = 0$, показанное на рис. 6 сплошной кривой. Как видно из формул (38) решению $\chi_p = 0$ соответствует нулевое электромагнитное поле.

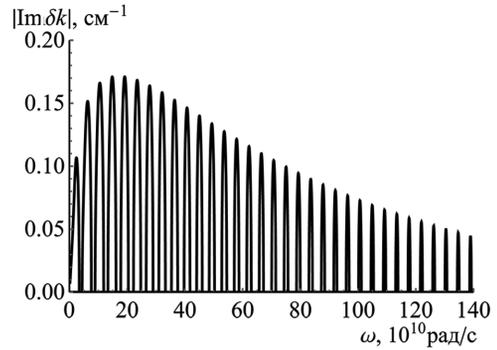


Рис. 8. Зависимость коэффициента усиления от частоты в диэлектрическом волноводе без плазмы, инверсная геометрия

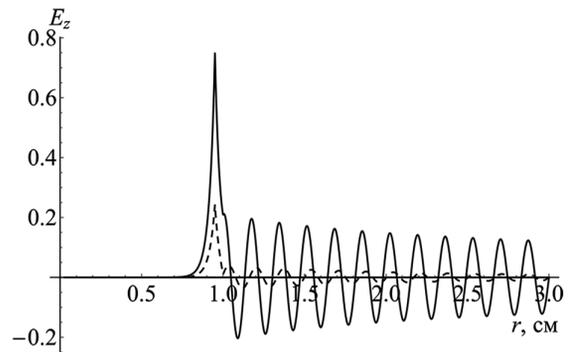


Рис. 9. Продольная компонента напряженности электрического поля моды $E_{0,24}$ при ее резонансном возбуждении электронным пучком в инверсной геометрии: $\text{Re } E_z$ — сплошная линия, $\text{Im } E_z$ — штриховая линия ($\omega = 100.8 \cdot 10^{10}$ рад/с, $k_z = (44.9 - 0.07i)$ см⁻¹)

буждается поскольку $\epsilon_d = 3 > c^2 / u^2 \approx 1.73$. Резонансы, возможные при различных диэлектрических проницаемостях ϵ_d , для электронного пучка со ско-

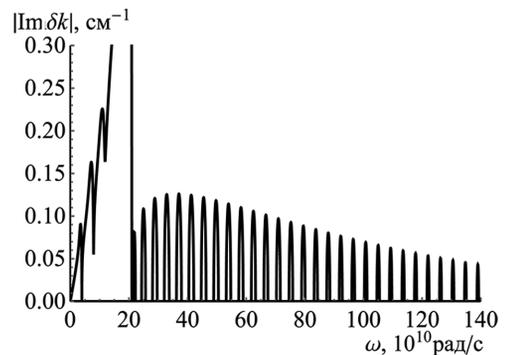


Рис. 10. Зависимость коэффициента усиления от частоты в плазменно-диэлектрическом волноводе, инверсная геометрия

ростью $u = 2.27 \cdot 10^{10}$ см/с показаны на рис.7.

Придем теперь к рассмотрению усиления волн в системе с инверсным заполнением. Пусть параметры плазменно-диэлектрического волновода и электронного пучка такие же, как и в случае, которому посвящены рис. 2–5, только поменяем местами плазму и диэлектрик, а радиус пучка положим $r_b = 0.95$ см. Результаты расчетов представлены на рис. 8, 9 и 10, являющихся аналогами рис. 2, 3 и 5 соответственно.

Обращает на себя внимание сходство рис. 5 и 10. Ранее утверждалось, что при $u > c/\sqrt{\epsilon_d}$, а именно это имеет место в случае рис. 5 и 10, в системе с инверсной геометрией возбуждение поверхностной плазменной волны невозможно. Однако, резонансное возбуждение объемной ленгмюровской волны имеет место для любой геометрии⁷⁾. Этот резонанс в виде самого высокого максимума имеется как на рис. 5, так и на рис. 10. Что касается максимумов в области $\omega < \omega_p$, то в случае рис. 5 один из них связан с резонансом на поверхностной плазменной волне, а в случае рис. 10 все максимумы обусловлены резонансами с электромагнитными волнами (см. рис. 6). В качестве основных особенностей инверсной геометрии являются более частое расположение зон усиления и меньшая ширина каждой зоны. Последнее, как нам представляется является серьезным недостатком системы с инверсной геометрией.

7. НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ЧЕРЕНКОВСКОГО УСИЛЕНИЯ ВОЛН В ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ В СЛУЧАЕ ПРЯМОЙ ГЕОМЕТРИИ

Перейдем теперь к нелинейной теории. Ограничимся случаем геометрии с внутренней локализацией диэлектрической вставки. В основу нелинейной теории черенковских плазменно-диэлектрических усилителей можно положить уравнение (18), которое с учетом (15) запишем в виде

$$D_0(\omega, k_z; R)E(r_b) = -D_0(\omega, k_z; r_b)I_0(\chi_p r_b) \times F_0(\chi_p r_b) \delta_b r_b \frac{\chi_p^2}{\epsilon_p} \frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle. \quad (46)$$

Здесь $E(r_b)$ — амплитуда поля (2) в месте прохождения электронного пучка. Если бы поле представлялось не в виде (2), а в виде

$$E_z(t, z, r) = \frac{1}{2}[E(z, r) \exp(-i\omega t + ik_{z\omega} z) + \text{c.c.}], \quad (47)$$

то в линейном приближении было бы $E(z, r) = E(r) \exp(i\delta k z)$, а в дисперсионном уравнении волновое число k_z заменилось бы на $k_{z\omega} + \delta k$ (см. (24)). В нелинейном случае формула (14) для плотности тока пучка не верна, но уравнение (46) по-прежнему актуально, если только переписать его в следующем операторном виде:

$$D_0(\omega, \hat{k}_z; R)E(z, r_b) = -W_0(\omega, \hat{k}_z; r_b) \frac{\delta_b r_b}{R^2} \frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(z; r_b) \rangle, \quad (48)$$

где волновое число k_z заменено на оператор волнового числа $\hat{k}_z = k_{z\omega} - id/dz$.

Для вычисления плотности нелинейного тока пучка используем метод интегрирования по начальным данным в постановке граничной задачи [18]. Опуская стандартную процедуру вывода, ее, например, можно найти в [6], приведем только окончательную формулу для плотности тока пучка

$$\langle j_b(z; r_b) \rangle = en_{0b} u \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \exp(i\omega\tau(z, \tau_0)) dt_0, \quad (49)$$

где n_{0b} — невозмущенная плотность электронов пучка. Функция $\tau(z, \tau_0)$ есть локальное время, в которое электрон пучка, влетевший в сечение волновода $z = 0$ в момент τ_0 , попадает в сечение z . Эта функция определяется из следующих уравнений движения:

$$\begin{aligned} \frac{d\tau}{dz} &= \frac{V}{u^2}, \\ \frac{dV}{dz} &= -\frac{e}{m\omega\gamma^3} \left(1 + 2\frac{u^2}{c^2} \gamma^2 \frac{V}{u} \right)^{3/2} \times \\ &\times \frac{1}{2} [E(z, r_b) \exp(-i\omega\tau(z, \tau_0)) + \text{c.c.}], \end{aligned} \quad (50)$$

а $V = V(z, \tau_0)$ — возмущение скорости электрона пучка. Граничные условия для уравнений (50) имеют вид

$$\tau(z = 0) = \tau_0, \quad V(z = 0) = 0. \quad (51)$$

Помимо условий влета электронов пучка (51) систе-

⁷⁾ Математически это описывается множителем ϵ_p^{-1} в выражениях (22) и (44) и связано с тем, что при любой геометрии пучок проходит в объеме плазмы.

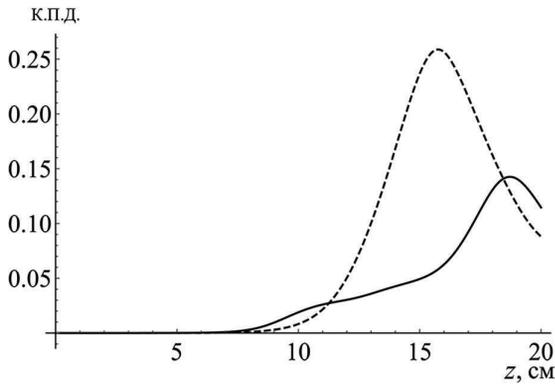


Рис. 11. Эффективности усиления высокочастотной электромагнитной волны на частоте $\omega = 50.6 \cdot 10^{10}$ рад/с (штриховая линия), $\omega = 100.9 \cdot 10^{10}$ рад/с (сплошная линия)

ма должна быть дополнена условием возбуждения волны на входе усилителя

$$E(z = 0, r_b) = E_0. \tag{52}$$

Если электронный пучок перед инъекцией в волновод был предварительно замодулирован, то условия (50) следует задать в виде

$$\begin{aligned} \tau(z = 0) &= \tau_0 + \alpha \sin(\tau_0 + p_0), \\ V(z = 0) &= \beta \sin(\tau_0 + q_0), \end{aligned} \tag{53}$$

где α, β, p_0, q_0 — постоянные, α определяет глубину модуляции пучка по плотности, а β задает глубину модуляции по скорости.

Псевдодифференциальное уравнение (48) для целей компьютерного моделирования не пригоден, его следует должным образом упростить. В силу неравенства (24) дисперсионный оператор $D_0(\omega, \hat{k}_z; R)$ и правую часть уравнения (48) можно разложить по id/dz , что приводит к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \left(D_0 - i \frac{\partial D_0}{\partial k_{z\omega}} \frac{d}{dz} \right) E(z, r_b) = \\ = - \frac{\delta_b r_b}{R^2} \frac{4\pi i}{\omega} \left(W_0 - i \frac{\partial W_0}{\partial k_{z\omega}} \frac{d}{dz} \right) \langle j_b(z; r_b) \rangle, \end{aligned} \tag{54}$$

где D_0 — функция (19) при $k_z = k_{z\omega}$ и $x = R$, а W_0 — функция (22) при $k_z = k_{z\omega}$. Уравнение (54) и уравнения (50) являются замкнутой нелинейной системой уравнений черенковского плазменно-диэлектрического усилителя. Эффективность усиления электромагнитных волн электронным пуч-

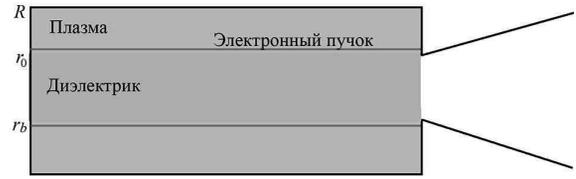


Рис. 12. Схема усилителя с плазменно-диэлектрическим волноводом в прямой геометрии

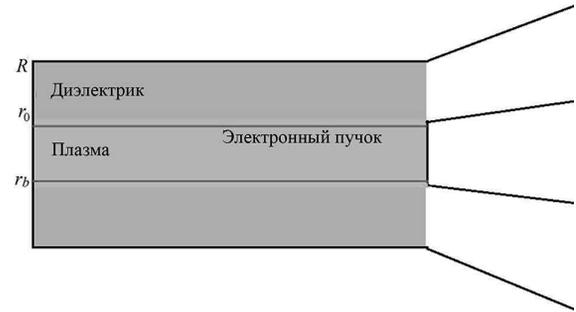


Рис. 13. Схема усилителя с плазменно-диэлектрическим волноводом в инверсной геометрии

ком (К.П.Д усилителя) можно определить очевидной формулой

$$\text{К.П.Д.} = \frac{\gamma - \langle \gamma(z, \tau_0) \rangle}{\gamma - 1}, \tag{55}$$

где угловые скобки означают усреднение по всем электронам, влетевшим в сечение $z = 0$ за период $2\pi/\omega$. Величина (55) зависит от координаты z , что позволяет определить оптимальную длину усилителя с точки зрения достижения максимальной эффективности и выходной мощности излучения.

В линейном приближении из уравнений (54) и (50) можно получить дисперсионное уравнение (25). Ранее, излагая линейную теорию, мы исходили не из решений приближенного уравнения (25), а из решений точного дисперсионного уравнения (19), что неслучайно. Дело в том, что в случае электронного пучка большой плотности решения уравнений (19) и (25) различаются, иногда значительно, хотя качественно они совпадают. Поэтому решение нелинейной задачи мы всегда предваряем линейным анализом. Нелинейные решения можно считать количественно достоверными, только в тех случаях, когда решения дисперсионных уравнений (19) и (25) близки. Систематическому анализу нелинейных режимов усиления мы посвятим отдельную работу. Здесь же приведем отдельные частные результаты, характеризующие возможные значения

эффективностей усиления и мощностей усиливаемых сигналов.

На рис. 11 для системы с параметрами $\omega_p = 20 \cdot 10^{10}$ рад/с, $r_0 = 1$ см, $R = 3$ см, $\varepsilon_d = 3$, $u = 2.27 \cdot 10^{10}$ см/с, $\omega_b = 2.5 \cdot 10^{10}$ рад/с представлены эффективности усиления на частотах восьмого и четырнадцатого резонансов. Максимальная эффективность от 15 до 25 процентов достигается на длине 15–25 см, после чего начинает падать. Как видим, эффективности усиления достаточно высокие, а оптимальные длины усилителей с экспериментальной точки зрения вполне приемлемые.

Одной из важных проблем при разработке черенковских усилителей на сильноточных электронных пучках является проблема вывода излучения через выходную границу области взаимодействия пучка и усиливаемой волны. Согласование области взаимодействия с излучающим устройством должно быть как можно лучше. Структура электромагнитного поля высоких мод рассмотренных плазменно-диэлектрических волноводов (см. рис. 3 и 9) подсказывает возможные схемы излучающих устройств. В случае волновода в прямой геометрии можно использовать обычный рупор с радиусом меньшим радиуса волновода (рис. 12). Стенки волновода и рупора должны находиться под потенциалом анода сильноточного ускорителя. При этом поверхность, соединяющая волновод с рупором, одновременно служит и коллектором для электронного пучка.

В случае волновода в инверсной геометрии можно использовать коаксиальный рупор (рис. 13), какой используется в действующих усилителях на кабельной плазменной волне [1–3]. Коллектором электронного пучка служит внутренняя часть коаксиала. При этом для выравнивания потенциалов используется перемычка между внутренней и внешней частями коаксиального рупора, что делает схему менее удобной по сравнению со схемой в случае прямой геометрии.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение сформулируем некоторые выводы из настоящей работы.

1. Использование волноводов с диэлектрическими вставками позволяет реализовать мощные одномодовые (одночастотные) усилители с рабочей частотой порядка 10^{12} рад/с и даже несколько выше (длина волны ~ 0.2 см и даже меньше). Эффектив-

ность усиления на длине ~ 20 см может достигать 15%. Для пучка электронов с током в 1 кА и энергией электронов 270 кэВ это означает выходную мощность порядка 40 МВт.

2. Присутствие в волноводах с диэлектрическими вставками плазмы следует считать нежелательным. С одной стороны, в субтерагерцовой области частот коэффициент усиления практически не зависит от наличия или отсутствия плазмы. С другой стороны, в области низких частот из-за возбуждения потенциальной объемной ленгмюровской волны с большим коэффициентом усиления возможно низкочастотное самовозбуждение излучателя, что приведет к подавлению усиления в субтерагерцовой области.

3. Характерные зависимости коэффициентов усиления от частоты свидетельствуют о возможности создания на основе волноводов с диэлектрическими вставками широкополосных усилителей, в том числе и шумовых. Действительно, как видно из рис. 2 и 8, коэффициент усиления состоит из набора достаточно узких линий примерно равной величины в широком частотном диапазоне. Есть основания считать, что при увеличении тока электронного пучка эти отдельные линии уширяются и сливаются в единую широкую область усиления электромагнитных волн.

4. Случай прямой геометрии волновода с диэлектрической вставкой из-за большей ширины зон усиления является предпочтительным по сравнению со случаем инверсной геометрии.

ЛИТЕРАТУРА

1. П. С. Стрелков, И. Е. Иванов, Е. Д. Диас Михайлова, Д. В. Шумейко, Физика плазмы **47** (3), 257-266 (2021).
2. A. V. Buleyko, A. V. Ponomarev, O. T. Loza, D. K. Ulyanov and S. E. Andreev, Physics of Plasmas **28**, 023303 (2021).
3. Д. К. Ульянов, Р. В. Баранов, О. Т. Лоза, С. Е. Ернылева, И. Л. Богданкевич, ЖТФ **83** (10), 113-116 (2013).
4. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, П. С. Стрелков, Плазменная релятивистская СВЧ-электроника, ЛЕНАНД, Москва (2018).
5. П. С. Стрелков, УФН **189** (5), 494 (2019).

6. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, ЖЭТФ **161** (2), 281 (2022).
7. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Электродинамика плотных электронных пучков в плазме*, ЛЕНАНД, Москва (2018).
8. М. А. Красильников и др., Физика плазмы **19** (8), 1061 (1993).
9. А. С. Шлапаковский, И. Шамилоглу, Физика плазмы **30** (7), 635-643 (2004).
10. С. П. Бугаев и др., Радиотехника и электроника **33** (2), 400 (1989).
11. Г. П. Кузьмин, И. М. Минаев, А. А. Рухадзе, Физика плазмы **36** (12), 1149 (2010).
12. Т. В. Баженова и др., ТВТ **44** (4), 580 (2007).
13. А. С. Шлапаковский, Письма в ЖТФ **25** (7), 43-50 (1999).
14. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, Высшая школа, Москва (1988).
15. М. В. Кузелев, *Волновые явления в средах с дисперсией*, URSS, Москва (2018).
16. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, УФН **152** (2), 285 (1987).
17. В. В. Богданов, М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, Физика плазмы **10** (3), 548 (1984).
18. Ю. В. Бобылев, М. В. Кузелев, *Нелинейные явления при электромагнитных взаимодействиях электронных пучков с плазмой*, Физматлит, Москва (2009).

МОДЕЛЬ СОЛИТОННОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ЧАСТИЧНО ЗАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАЗМЫ

*И. Х. Ковалева, А. Т. Ковалев**

*Институт динамики геосфер им. М. А. Садовского Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 декабря 2023 г.,
после переработки 21 января 2024 г.
Принята к публикации 24 января 2024 г.

Проведено теоретическое рассмотрение высокочастотных микрофлуктуаций, формирующихся электронным током поперек магнитного поля. Получено уравнение Гинзбурга – Ландау с нелокальным членом для описания динамики электронно-циклотронных дрейфовых флуктуаций. Определены пороги перехода в турбулентный режим и границы, в которых может реализоваться режим турбулентности солитонов, в зависимости от параметров этого уравнения.

DOI: 10.31857/S0044451024060142

1. ВВЕДЕНИЕ

Многочисленные активные космические эксперименты по выбросам скоростных или образующих взрывом плазменных облаков показали, что на фронте плазменного облака образуется область со значительным нагревом электронов, увеличением скорости ионизации и аномальным переносом, когда поперечный транспорт электронов во много раз превышает уровень классической и бомовской диффузии. Это явление в физике космической плазмы имеет название CIV — явление критической скорости ионизации (см. обзор [1]). Активные ионосферные эксперименты основной своей задачей часто видели исследование именно этого явления. В этих представлениях интерпретировались экспериментальные данные, например, в эксперименте CRIT II [2, 3]. В свое время ряд участников активного космического эксперимента CRIT II увидели аналогию в этих процессах в космосе и лабораторной плазме магнетронов и холловских двигателей и предприняли попытки более подробно исследовать это явление в лабораторных условиях [4, 5]. Представляется разумным использовать обширный экспериментальный материал и теоретические нара-

ботки, сделанные в исследовании аномального переноса, нагрева и ионизации в лабораторной плазме магнетронов и холловских двигателей применительно к космической плазме.

Как правило, для объяснения переноса электронов в этих задачах привлекается одна из гипотез: электронно-циклотронные дрейфовые волны, неустойчивость Симона – Хопфа, нижнегибридная, модифицированная двухпотоковая или ионно-звуковая неустойчивость. Основными факторами, возбуждающими неустойчивость, считают градиенты плотности, магнитного поля, температуры, дрейфовое движение и диссипацию. Как правило, в теоретических рассуждениях проводят четкую границу между жидкостным рассмотрением низкочастотных длинноволновых возмущений и кинетическим рассмотрением коротковолновых возмущений. В кинетических рассуждениях обычно плазма бездиссипативна. Во многих случаях пытаются учесть нелинейные эффекты. В том числе методом частиц в ячейке были получены электронно-циклотронные волновые структуры. В качестве нескольких примеров нелинейных числовых моделей и расчетов можно привести работы [6–8]. Ряд авторов связывают аномальный перенос с существованием нелинейных структур (например, [9]).

В ионосферных экспериментах концентрация электронов в плазменных образованиях имеет те же порядки величины (10^{10} – 10^{11} см⁻³). При

* E-mail: akoval@idg.chph.ras.ru

этом электрическое и магнитное поля меньше на 2–3 порядка (≈ 0.5 Гс и ~ 1 В/м соответственно). Столь малые величины магнитного поля в ионосфере (по сравнению с лабораторными) приводят к значительному сдвигу частот части из этих неустойчивостей. В результате для объяснения высокочастотной турбулентности в ионосферных экспериментах наиболее предпочтительной представляется электронно-циклотронная дрейфовая (ЭЦД) турбулентность. При этом нет заметного отклонения функции распределения электронов от максвелловской, вследствие значительно меньших значений электрического поля. Скорость направленного дрейфа электронов много меньше тепловой скорости электронов. Параметры задачи выходят за пределы проведенного в работе [10] кинетического рассмотрения. Это позволяет предположить возможность жидкостного рассмотрения высокочастотной турбулентности с учетом диссипации. Кроме того, геометрия разлетающейся плазмы, в которой ионный ларморовский радиус сопоставим с шириной плазменного фронта, а электронный ларморовский радиус гораздо меньше, позволяет в отличие от [11] использовать для построения нелинейных структур модели частично замагниченной плазмы.

В настоящей работе предпринята попытка построить модель мелкомасштабных, быстро движущихся высокочастотных нелинейных волновых структур электронов, формирующихся в плазме при наличии электронного дрейфа за счет электрического поля поперек магнитного (в $E \times B$ -плазме). В отличие от воспроизводимых условий лабораторной плазмы, в ионосферных условиях при рассмотрении динамики плазменных образований основными вопросами становятся параметры плазмы, соответствующие различным режимам мелкомасштабной турбулентности, условия и временные параметры ее развития и производимые этой турбулентностью эффекты. Поэтому для описания турбулентности на основе системы жидкостных уравнений и уравнений Максвелла методом разложения по малому параметру было получено одномерное комплексное уравнение Гинзбурга–Ландау (КГЛ) с дополнительным нелокальным (интегральным) нелинейным членом, как наиболее простая модель ЭЦД-турбулентности вблизи порога ее возникновения. Исследованы границы перехода к турбулентности. Получена область параметров плазмы, соответствующая турбулентности солитонов, с которой, по мнению авторов, и связан режим аномального переноса.

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ МОДЕЛИ

Для высокочастотных мелкомасштабных флуктуаций плазму можно считать частично замагниченной, так как масштабы флуктуаций много меньше ларморовского радиуса ионов. Для лабораторной плазмы ряд авторов связывает рост неустойчивости с немаксвелловским распределением электронов по скоростям, однако в приводимом в настоящей работе рассмотрении принимается более простая модель искажения распределения в виде добавления скорости дрейфа в максвелловское распределение. При этом факторами, определяющими рост неустойчивости и ее нелинейную стабилизацию, принимаются градиент плотности плазмы и столкновения и диффузия электронов.

В нашем рассмотрении использовалась система жидкостных уравнений для движения электронов в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Не учитывается изменение температуры на масштабе мелкомасштабной высокочастотной турбулентности, не учитывается тензор гировязкости (неприменимый на таких масштабах). В то же время представляется необходимым учесть электромагнитные поправки, так как при фиксируемых в эксперименте температурах электронов $T_e \geq 1$ эВ чисто электростатических волн не существует.

Система уравнений предполагает колебательное движение только электронов на фоне неподвижных ионов. Дополнительный учет движения ионов приводит к учету пондеромоторной силы, вносящей поправку в нелинейный член. Дрейф электронов осуществляется вдоль оси x со скоростью u_d . Магнитное поле направлено вдоль оси z . Ищется волновое возмущение, распространяющееся вдоль направления дрейфа (оси x) перпендикулярно магнитному полю. В систему уравнений входят

1) уравнения движения электронов по осям x и y :

$$m_e n_e \frac{d\mathbf{V}_e}{dt} = en_e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{H} \right) - \nabla p_e; \quad (1)$$

уравнения непрерывности и Пуассона

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla(n_e \mathbf{V}_e) &= -eD\nabla^2 n_e, \\ \frac{\partial E_x}{\partial x} &= n_{i0} - n_e; \end{aligned} \quad (2)$$

2) два уравнения Максвелла, вводящие электромагнитные поправки:

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \\ \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3)$$

При квазиодномерном рассмотрении все величины зависят только от координаты x и времени t при учете изменения скоростей электронов по осям x и y , компонент магнитного поля H_z и электрического поля E_x и E_y . Кроме того, предполагается неравномерность вдоль оси x плотности электронного газа

$$\gamma_n = \frac{\partial \ln(n_e(x))}{\partial x}.$$

В основе моделирования лежит разложение по малому параметру системы уравнений в безразмерном виде. Переменные нормированы на соответствующие константы: время t — на обратную плазменную частоту ω_{pe}^{-1} , пространственная координата — на дебаевский радиус r_D , скорости — на тепловую скорость электронов. Метод разложения Крылова–Боголюбова–Митропольского [12, 13] позволяет получить дисперсионное уравнение и уравнение Гинзбурга–Ландау для амплитуды волнового возмущения электрического поля.

В работе [14] при рассмотрении двухжидкостной плазмы в 5-моментном приближении было получено, что ЭЦД-дисперсионное соотношение имеет два асимптотических решения. Одно из них подобно ионно-звуковой моде, а другое согласуется с дисперсионным соотношением, полученным в нашем разложении. Эта мода в данной работе определена как соотношение для доплеровски сдвинутых «гибридных» волн. Авторы предполагают, что волны возникают на пересечении этих двух ветвей дисперсионной кривой, формируя результирующий нелинейный отклик. Используемая в настоящей работе система уравнений дополнена так, что в дисперсионное соотношение, полученное в этой работе, входят две поправки. Одна определяется учетом электромагнитных возмущений (двумя уравнениями Максвелла). Другая поправка введена как диссипативный член для учета роли диссипации в формировании нелинейной волновой структуры. Этот диссипативный член аналогичен члену, входящему в уравнение (25) работы [15] — уравнение непрерывности. Это диффузионный член $D \nabla_{\perp}^2 n$, где коэффициент диффузии $D = \nu \rho_e$ зависит от ларморовского радиуса электронов ρ_e и частоты их соударений ν как с ионами, так и с нейтральной компонентой. Внимание именно к диффузии при рассмотрении динамики плазменного образования связано еще и с тем, что в работе [9] при анализе результатов численного моделирования именно диффузии, приводящей к размыванию резонансов, отводится основная роль в формировании частотного спектра.

Действительная частота в безразмерных переменных находится из уравнения (4):

$$\text{Disp} = -(\omega - ku_d)^2 + k^2 + 1 + \frac{\omega_{ce}^2/\omega_{pe}^2}{1 + (V_{Te}^2/c^2)/k^2} + \Delta D' = 0. \quad (4)$$

Мнимая компонента частоты λ определяет поправку

$$\Delta(D') = 3\lambda^2 + 2\lambda D' k^2,$$

связанную с коэффициентом диффузии D' (в безразмерном виде).

Результирующее уравнение можно рассматривать как нелинейное уравнение Шредингера или комплексное уравнение Гинзбурга–Ландау с дополнительными членами с коэффициентами c'_1 , c'_2 , второй из которых представляет коэффициент при нелокальном интегральном члене:

$$iA_t + PA_{xx} + Q|A|^2 A = i\delta' A + i\beta' A_{xx} + i\varepsilon' |A|^2 A - c'_1 A_x - c'_2 A \int_{-\infty}^x e^{\gamma(x'-x)} |A|^2 dx'. \quad (5)$$

Сокращение A_{xx} соответствует $\partial^2 A / \partial x^2$; A_t соответствует $\partial A / \partial t$ и т.д. Коэффициент P равен

$$P = \frac{1}{2} \frac{\partial V_g}{\partial k}.$$

Коэффициент δ' определяется разностью членов, пропорциональных градиенту плотности и частоте соударений электронов; коэффициенты β' и ε' определяются коэффициентом диффузии; коэффициент c_1 определяется частотой соударений электронов. Все эти коэффициенты зависят от волнового вектора. Точная форма определяющих коэффициенты выражений не приводится, так как некоторые из них достаточно громоздки. Дальнейшее рассмотрение проводится только для значений волновых векторов, соответствующих аномальной дисперсии уравнения.

Уравнение такого вида является наиболее простым уравнением, описывающим систему вблизи порога турбулентности. Для области волновых векторов, соответствующей аномальной дисперсии, уравнение описывает область субкритической бифуркации, когда выше некоторого порога градиента плотности плазмы резко меняется режим флуктуаций, возникает турбулентность (см. [16] и цитируемую там литературу). В области вблизи порога бифуркации возможно формирование солитонной турбу-

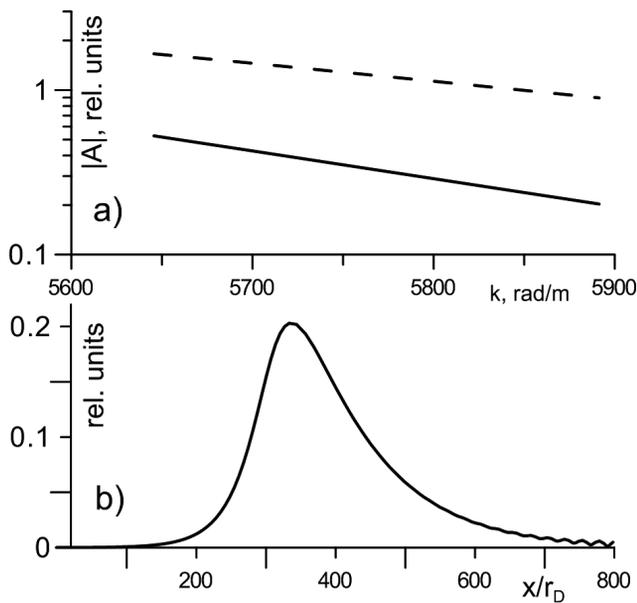


Рис. 1. *a* — Амплитуда точного решения (сплошная линия) и аналитической оценки (штриховая линия). *b* — Пример формы солитона

лентности. Возможность формирования такого режима отмечена в работах [17, 18] в случае, если существует механизм стабилизации амплитуды солитонов.

Рассмотрение режимов КГЛ, как правило, осуществляется для формы уравнения, нормированной так, что

$$P = \pm \frac{1}{2}, \quad Q = \pm 1.$$

При стандартном преобразовании нормировки уравнение приводится к виду, зависящему от меньшего количества параметров:

$$iA_t + A_{xx} + |A|^2 A = i\delta A + i\beta A_{xx} + i\varepsilon |A|^2 A - c_1 A_x - c_2 A \int_{-\infty}^x e^{\gamma(x'-x)} |A|^2 dx'. \quad (6)$$

В такой форме основными факторами, от которых зависит решение, становятся δ и β . Уравнение в таком виде рассматривалось многими авторами. Стабилизирующая роль нелокальных (интегральных) членов различного вида в КГЛ в последние годы анализировалась в работах [19–21]. Дополнительные диссипативные и нелокальный члены в полученном нами уравнении позволяют сделать вывод о возможности формирования турбулентности солитонов. Для оценки амплитуд возникающих солитонов использовались работы [22, 23] с несколь-

ко иным интегральным членом $A \int_{-\infty}^x |A|^2 dx$ в режиме получения автосолитонов [24, 25]. Точное полуаналитическое решение было получено методом, предложенным в работе [26]. Сравнение его с аналитической оценкой показывает, что такая оценка дает в несколько раз завышенные амплитуды солитонов и не учитывает искажение их формы. Но данные решения позволяют оценить диапазон параметров плазмы, в которых существуют устойчивые солитоны (устойчивость солитонов оценивалась методом, описанным в работах [27, 28]), и сделать оценку их амплитуд и волновых векторов. Режим устойчивых солитонов реализуется только для флуктуаций с волновыми векторами $k > k_s$, где $k_s^2 \sim \delta/\beta$. Таким образом, данное решение относится только к коротковолновой турбулентности.

Сравнение амплитуд аналитической оценки и точного решения приведены на рис. 1*a*. Сплошная линия — амплитуды точных решений, штриховая — аналитическая оценка. На рис. 1*b* приведен пример формы солитона. Экспонента в подынтегральном выражении интеграла, входящего в уравнение (6), приводит к искажению формы солитона и сдвигам частоты.

Пределы устойчивости определяют нижнюю границу волновых векторов солитонов на рис. 1*a*. Асимметричная форма солитонов (см. рис. 1*b*) определяется значением градиента плотности.

На рис. 2 приведены области существования турбулентности солитонов в зависимости от двух определяющих параметров δ и β . На рис. 2*a* эти области приведены для плазмы, характерной для магнетронов, с большими магнитным и электрическим полями и большим уровнем ионизации. В этом случае плазма имеет следующие параметры: $n_e = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$; $u_d/v_{Te} = 0.02$ (заштрихованная область в границах 1) и $u_d/v_{Te} = 2.0$ (заштрихованная область в границах 2). Правее этой области формируется хаотическая турбулентность. Основной вывод, который можно сделать из этого графика: турбулентность солитонов реализуется только при небольших отклонениях δ от нуля и при увеличении электрического поля область реализации турбулентности солитонов уменьшается и частично переходит в хаотическую. На рис. 2*b* приведена область турбулентности солитонов, реализуемая при параметрах, соответствующих условиям космического эксперимента. В этом случае $n_e = 5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $u_d/v_{Te} = 0.002$. При этих условиях турбулентность солитонов реализуется при $\delta < 0$. Солитоны имеют отрицательную групповую скорость.

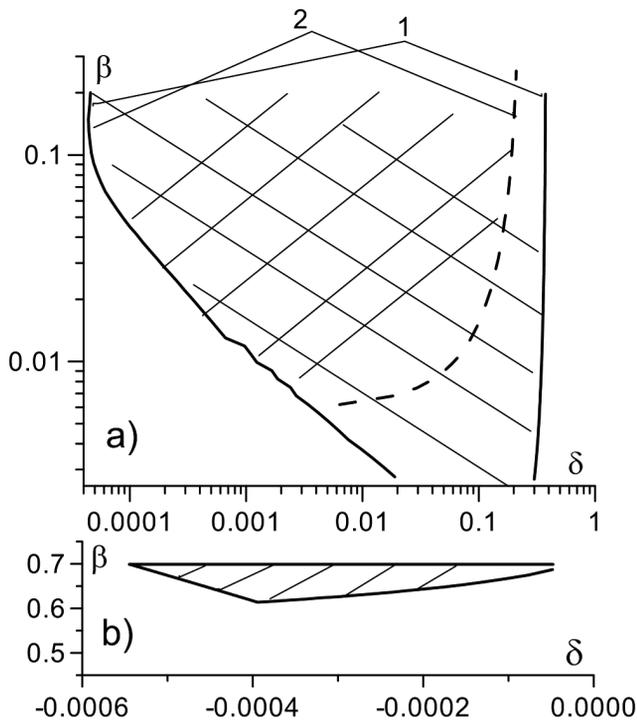


Рис. 2. Границы областей параметров, при которых реализуется турбулентность солитонов: *a* — при концентрации плазмы $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ и двух значениях дрейфовой скорости; *b* — при концентрации плазмы $5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$

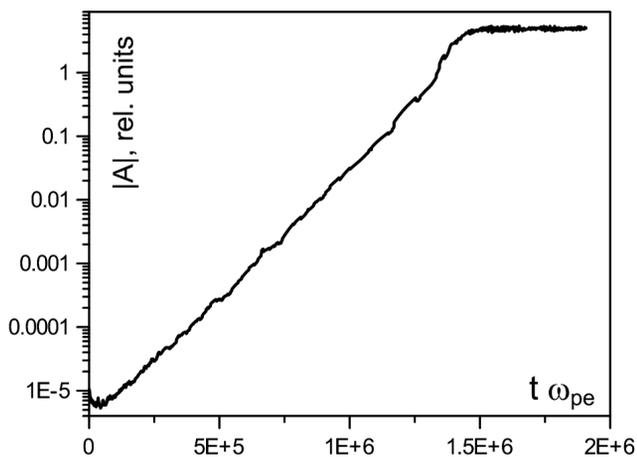


Рис. 3. Зависимость от времени средней амплитуды колебаний $|A|$

3. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Для подтверждения возможности формирования последовательности солитонов в системе, описываемой приведенным выше уравнением, был проведен численный расчет выхода на устойчивые решения начального хаотического возмущения малой амплитуды при значениях параметров системы, соответствующих области устойчивых солитонов, в

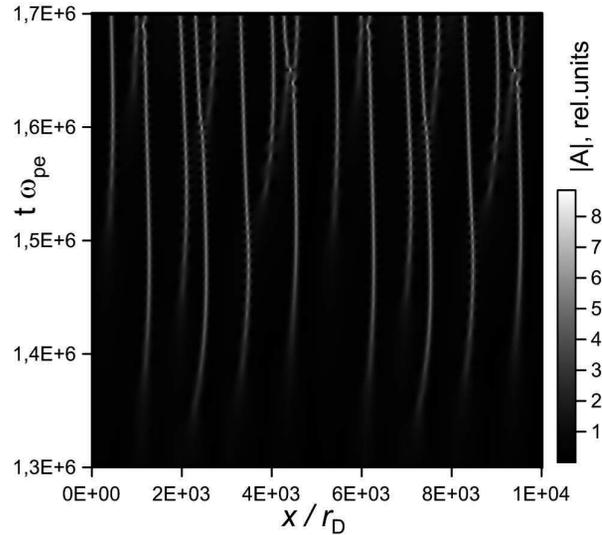


Рис. 4. Численное решение системы (6)

частности, в точке $\delta = 0.0773$, $\beta = 0.0176$, лежащей в области турбулентности солитонов на плоскости рис. 2*a*. Уравнение (6) решалось на отрезке длиной $L/r_D = 10^4$ с числом точек 2048, в системе координат, движущейся со скоростью дрейфа солитонов, равной $-0.765 \cdot 10^{-2}$. Для аппроксимации пространственных производных использовалась схема компактного дифференцирования (см., например, [29]) с периодическими граничными условиями. Небольшое начальное возмущение задавалось в виде случайных колебаний с частотами в пределах частоты Найквиста. Для интегрирования по времени использовался метод Рунге – Кутты 6-го порядка. На рис. 3 приведена зависимость от времени средней амплитуды колебаний на рассматриваемом отрезке. В течение приведенного времени $t \omega_{pe} \approx 10^6$ амплитуда формирующихся солитонов стабилизируется. Полученная при решении системы (6) зависимость $|A(x, t)|$ представлена на рис. 4. Наблюдается формирование солитонных структур с ограниченной амплитудой.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе показана возможность формирования мелкомасштабных волновых структур ЭЦД. Это рассмотрение позволяет найти область параметров, в которых формируется турбулентность солитонов и связанный с ними аномальный перенос плазмы. Получение данных критериев солитонной турбулентности может помочь как при численном моделировании бесстолкновительного разлета плазмы в ионосфере, так и при анализе экспериментальных данных по такому разлету.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Госзадания № 122032900184-8.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Brenning, Space Sci. Rev. **59**, 209 (1992).
2. C. M. Swenson, M. C. Kelley, F. Primdahl et al., Geophys. Res. Lett. **17**, 2337 (1990).
3. O. Bolin, N. Brenning, C. M. Swenson et al., J. Geophys. Res. A **101**, 19729 (1996).
4. N. Brenning, R. L. Merlino, D. Lundin et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 225003 (2009).
5. N. Brenning and D. Lundin, Phys. Plasmas **19**, 093505 (2012).
6. O. Koshkarov, A. Smolyakov, Y. Raitses et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 185001 (2019).
7. K. Hara and S. Tsikata, Phys. Rev. E **102**, 023202 (2020).
8. А. Смоляков, Т. Зинтель, Л. Кедейл и др., Физика плазмы **46**, 408 (2020).
9. S. Janhunien, A. Smolyakov, O. Chapurin et al., Phys. Plasmas **25**, 011608 (2018).
10. A. Ducrocq, J. C. Adam, A. Heron et al., Phys. Plasmas **13**, 102111 (2006).
11. S. I. Popel, S. V. Vladimirov, and V. N. Tsytovich, Phys. Rep. **259**, 327 (1995).
12. T. Kakutani and N. Sugimoto, Phys. Fluids **17**, 1617 (1974).
13. А. Найфэ, *Введение в методы возмущений*, Мир, Москва (1984).
14. L. Wang, A. Hakim, B. Srinivasan et al., arXiv: 2107.09874v2 [physics.plasm-ph] (2022).
15. A. Smolyakov, O. Chapurin, W. Frias et al., Plasma Phys. Control. Fusion **59**, 014041 (2017).
16. I. S. Aranson and L. Kramer, Rev. Mod. Phys. **74**, 99 (2002).
17. В. Е. Захаров, А. Н. Пушкарев, В. Ф. Швец и др., Письма в ЖЭТФ **48**, 79 (1988).
18. А. И. Дьяченко, В. Е. Захаров, А. Н. Пушкарев и др., ЖЭТФ **96**, 2026 (1989).
19. M. Golles, S. Darmanyán, F. Lederer et al., Opt. Lett. **25**, 293 (2000).
20. A. Picozzi and J. Garnier, Phys. Rev. Lett. **107**, 233901 (2011).
21. S. Wabnitz, Opt. Lett. **20**, 1979 (1995).
22. V. S. Grigoryan and T. S. Muradyan, J. Opt. Soc. Amer. B **8**, 1757 (1991).
23. S. K. Turitsyn, Phys. Rev. E **54**, R3125 (1996).
24. Б. С. Кернер, В. В. Осипов, УФН **154**, 201 (1989).
25. Б. С. Кернер, В. В. Осипов, УФН **160**, 2 (1990).
26. J. M. Soto-Crespo, N. Akhmediev, and K. S. Chiang, Phys. Lett. A **291**, 115 (2001).
27. N. Akhmediev and J. M. Soto-Crespo, Phys. Lett. A **317**, 287 (2003).
28. Н. Ахмедиев, А. Анкевич, *Диссипативные солитоны*, Физматлит, Москва (2008).
29. S. K. Lele, J. Comput. Phys. **103**, 16 (1992).

ИЗУЧЕНИЕ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ СВИНЦА

*Е. М. Анфельбаум, А. М. Кондратьев, А. Д. Рахель**

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

Поступила в редакцию 12 января 2024 г.,
после переработки 30 января 2024 г.
Принята к публикации 30 января 2024 г.

Проведены измерения термодинамических функций и удельного сопротивления плотной плазмы свинца для значений удельного объема, в 5–20 раз больших нормального значения, давлений 0.4–4.0 ГПа и значений удельной внутренней энергии, которые в 3–18 раз больше энергии сублимации. Измеренные зависимости сравниваются с зависимостями, рассчитанными с помощью химической модели классической плазмы. Целью работы было обнаружение эффектов неидеальности в термодинамических свойствах и поведении удельного сопротивления плазмы. Один из обнаруженных эффектов состоит в том, что коэффициент Грюнайзена такой плазмы во всей исследованной области состояний принимал значения в относительно узком интервале 0.2–0.4. Показано, что химическая модель почти в два раза занижает затраты энергии на ионизацию плазмы и возбуждение атомов и примерно во столько же раз завышает температуру. Установлено, что во всей исследованной области состояний плазмы «ионизация давлением» играет существенную роль: на изотермах удельное сопротивление уменьшается с уменьшением удельного объема.

DOI: 10.31857/S0044451024060154

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение плотной плазмы со степенью ионизации порядка единицы наталкивается на серьезные трудности со стороны как теории, так и эксперимента. Теоретические проблемы связаны с тем, что для такой системы параметр взаимодействия, т. е. отношение энергии кулоновского взаимодействия между частицами плазмы к их кинетической энергии, принимает значения порядка единицы. В этом случае применение теории возмущений с использованием в качестве невозмущенной системы идеального газа весьма затруднительно.

Экспериментальные трудности в исследовании плотной плазмы с развитой ионизацией связаны с высокими температурами и давлениями, при которых такая плазма может существовать и которые для подавляющего большинства элементов периодической системы недостижимы в статических экспериментах. Для изучения такой плазмы применяют различные динамические экспериментальные методы [1–4]. Однако для этих экспериментов остаются

открытыми вопросы об однородности получаемой плазмы и о достоверной оценке погрешности измерений [5]. Сравнение значений удельного сопротивления плазмы алюминия, измеренных в экспериментах [4], с результатами более точной методики [6] показало, что погрешности измерений [4] составляют 20–30 % (см. рис. 7 работы [6]). Такая же по порядку величины оказывается и погрешность эксперимента [2], как это следует из сравнения, представленного на рис. 5 работы [7]. Столь большие погрешности измерений не позволили выявить характерные свойства неидеальной плазмы, связанные с сильным взаимодействием между частицами.

Для исследования свойств металлов в жидком состоянии и в состоянии сверхкритического флюида был разработан динамический экспериментальный метод [8], который позволяет проводить измерения с погрешностью не хуже 3–5 % (в зависимости от измеряемой величины). С помощью этого метода были проведены измерения термодинамических функций и удельного электрического сопротивления свинца [9], а также эвтектики свинец–висмут [10] для широкой области состояний на плоскости VP (V — удельный объем, P — давление). На основании полученных данных были построены калорические уравнения состояния (УРС) этих

* E-mail: rakhel@oivtran.ru

флюидов и оценены критические точки перехода жидкость–газ и перехода металл–неметалл [10]. Существенной особенностью такого УРС является то, что его точность зависит только от погрешности экспериментальных данных, на основании которых определяются две характеристические функции — зависимости коэффициента Грюнайзена и холодной составляющей внутренней энергии от удельного объема. Поскольку в каждом отдельном эксперименте [9, 10] измеряется зависимость удельной внутренней энергии образца от удельного объема и давления вдоль некоторой линии на плоскости VP (которая выходит из нормального состояния), а не в одной точке на ударной адиабате или изэнтропе разгрузки, как это имеет место в ударно-волновых экспериментах [11], это позволит провести достаточно точный анализ поведения изоохор в плоскости PE (E — удельная внутренняя энергия). На основании такого анализа была установлена общая закономерность: в пределах погрешности измерений эти изоохоры являются прямыми линиями. Этот факт позволил установить вид функции $P(V, E)$, т. е. калорическое УРС, на основании общих термодинамических соотношений [12], а также измерить с необходимой точностью зависимости коэффициента Грюнайзена и холодной составляющей внутренней энергии от относительного объема [9, 10]. При этом не нужно делать предположений о том, каков вид этих зависимостей [11].

Погрешности измерений [9, 10] для интервала удельных объемов, близких к нормальному значению, для которого имеются точные литературные данные, были надежно оценены и оказались не хуже 3%. Однако для области состояний $P > 0.3$ ГПа, $V > 4V_0$ (V_0 — нормальное значение удельного объема исследуемого металла) литературных данных нет. Для оценки систематической погрешности экспериментов [9, 10] в этой области состояний был разработан метод по прямому измерению скорости ударных волн, возбуждаемых в образце во время динамического эксперимента. Поскольку ударная адиабата исследуемого металла может быть определена с помощью предварительно построенного калорического УРС, а точность последнего, как отмечалось выше, зависит только от точности экспериментальных данных, то, сравнивая измеренные значения скорости ударных волн со значениями, рассчитанными с помощью УРС, можно оценить систематическую погрешность измерений при больших значениях удельного объема образца и давления. Такая работа была выполнена в экспериментах со свинцом [13], и были оценены погрешности измере-

ний для интервала объемов $V/V_0 = 2 - 7$ и интервала давлений $P = 0.4 - 3.4$ ГПа. В настоящей работе представлены экспериментальные данные по свойствам плотной плазмы свинца для области состояний $V/V_0 = 6 - 20$, $P = 0.4 - 4$ ГПа.

Для интерпретации результатов этих экспериментов использовалась химическая модель плазмы (ХМП) [14, 15]. В этой модели плазма рассматривается как равновесная смесь нейтральных атомов, положительных ионов с зарядами $ze = 1 - 4$ (e — элементарный заряд, z — кратность ионизации) и электронов. Свободная энергия плазмы представляется в виде суммы свободной энергии идеального газа такой смеси частиц и трех слагаемых, которые описывают три вида взаимодействия между ними: взаимодействие между заряженными частицами, между заряженными частицами и атомами и взаимодействие между атомами. Отметим, что ионы в этой модели рассматриваются как точечные классические частицы, а вклад в свободную энергию от взаимодействия между ионами, а также между ионами и свободными электронами описывается с помощью аналитической зависимости [16]. Взаимодействия заряд–атом и атом–атом описываются с учетом только парных взаимодействий, т. е. с точностью до второго члена вириального разложения. Минимизация свободной энергии по отношению к числам частиц всех сортов позволяет определить состав плазмы (при заданных значениях температуры, объема и полного числа атомов). После расчета состава плазмы можно определить ее термодинамические функции, которые получаются путем дифференцирования свободной энергии как функции удельного объема и температуры. Удельное сопротивление плазмы вычислялось в рамках приближения времени релаксации [14]. Поскольку используемая здесь ХМП уже детально описана [14, 15], мы не будем излагать ее более подробно. Заметим только, что, строго говоря, эта модель может применяться для описания плазмы относительно низкой плотности, когда можно с достаточной точностью определить такие составные частицы, как молекулу, изолированный атом или ион. Однако несмотря на ограниченную область применимости, химические модели плазмы позволяют получать качественно верные результаты и для области состояний, где параметр взаимодействия не мал [17, 18].

В настоящей работе были проведены измерения термодинамических функций и удельного сопротивления свинца для области состояний, в которой удельный объем, температура и давление превышают значения в критической точке фазового пере-

да жидкость–газ. Как известно, область состояний вещества, в которой температура и давление превышают критические значения, называют сверхкритическим флюидом. В этой работе, следовательно, мы будем иметь дело с газообразным сверхкритическим флюидом. Такой флюид, как будет показано ниже, имеет относительно низкое удельное сопротивление: его значения всего лишь в 2–6 раз выше значения удельного сопротивления жидкого свинца в металлическом состоянии вблизи предела Мотта–Иоффе–Регеля [9]. Таким образом, у нас имеются все основания называть такой сверхкритический флюид плотной плазмой. Основной целью этой работы было обнаружить характерные особенности плотной плазмы (в термодинамических функциях и поведении удельного сопротивления), связанные с сильным взаимодействием между частицами.

В случае классической плазмы, для которой вырождение электронов и квантовые эффекты рассеяния несущественны, в качестве параметра взаимодействия обычно берут отношение потенциальной энергии электростатического отталкивания соседних ионов, расположенных на среднем расстоянии друг от друга (без учета корреляций), к их средней кинетической энергии. Если обозначить среднее число ионов в единице объема как n_i , то среднее расстояние между ними будет порядка $n_i^{-1/3}$, а их средняя кинетическая энергия, согласно закону равнораспределения, будет порядка температуры. Для параметра взаимодействия, который будем обозначать буквой Γ , получим выражение

$$\Gamma = \frac{z^2 e^2}{kT} n_i^{1/3}, \quad (1)$$

где T — температура, k — постоянная Больцмана. Для плазмы свинца, которая изучается в этой работе, $n_i = (1 - 8) \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $T = 10 - 40 \text{ КК}$, $z = 1 - 2$, $\Gamma = 0.5 - 5$. При этом ионная компонента плазмы не вырождена, а параметр вырождения электронной компоненты $\vartheta = kT/\varepsilon_F$ принимает значения $\vartheta = 1 - 10$, где ε_F — энергия Ферми, которая определяется согласно формуле

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}, \quad (2)$$

где m — масса электрона, n_e — среднее число электронов в единице объема.

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МЕТОДИКИ

Для проведения измерений использовалась экспериментальная методика работ [9, 10]. Отметим

только некоторые изменения, которые были внесены в нее в процессе выполнения настоящей работы. После того как была оценена систематическая погрешность таких измерений при больших значениях удельного объема образца [13], стало возможным изучать свойства металлов в газообразном состоянии. В качестве материала образца для изучения плотной плазмы был выбран свинец по той причине, что образцы нужной толщины и качества для наших экспериментов (отрезки фольг) можно было изготавливать в лаборатории. В этом случае фольги нужно было делать достаточно тонкими (9–15 мкм). Это необходимо для того, чтобы нагрев образца оставался однородным, а его тепловое расширение — одномерным и при больших значениях объема. Для этого требуется выполнение двух условий: толщина образца должна быть малой по сравнению с его шириной и длиной (которые для этих экспериментов составляли около 10 мм), а скорость вещества должна быть малой по сравнению со скоростью звука. Поскольку время измерений для таких экспериментов составляет около 1 мкс и фактически определяется геометрическими размерами пластин оконного материала, получение больших приращений толщины образца за это время, при относительно малых значениях скорости, накладывает ограничение сверху на его исходную толщину. Свинец был выбран еще и по той причине, что для него были ранее получены экспериментальные данные по свойствам жидкого состояния [9, 13], и это позволило более точно оценить погрешности настоящих измерений.

Для контроля одномерности теплового расширения образца при больших значениях объема, в настоящих экспериментах использовались одновременно два интерферометра. Схема поперечного сечения образца и расположение интерферометров показаны на рис. 1. Пучок лучей одного интерферометра (IntC) отражался от центральной части поверхности образца, а пятно второго интерферометра (IntS) было сдвинуто в сторону на 2–3 мм. В этих экспериментах использовались пластины оконного материала размером $5 \times 10 \times 10 \text{ мм}^3$. Склеенная экспериментальная сборка, состоящая из пластин оконного материала, образца и боковых пластин технического стекла, представляла собой прямоугольный параллелепипед, два ребра которого имели длину около 10 мм, а третье (которое параллельно оси y на рис. 1) — 16 мм. Во всех экспериментах ширина и длина образца были равны соответственно ширине и длине пластин оконного материала. Такая сборка позволяла поддерживать практически одномерную деформацию пластин оконного материала в течение

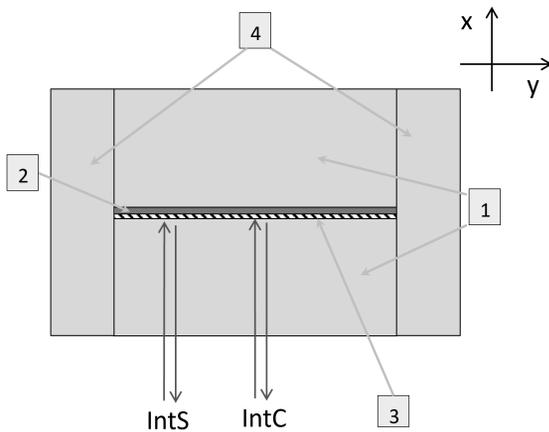


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схема поперечного сечения экспериментальной сборки плоскостью, перпендикулярной направлению электрического тока: пластины оконного материала (1); образец (2); боковые пластины из технического стекла (4). Показано направление лучей двух лазерных интерферометров (*IntC*, *IntS*), а также диэлектрическое зеркало (3), от которого отражаются лучи интерферометров (зеркало нанесено на поверхность пластины)

времени $t \leq 2D/c_l$, где D — толщина пластин, а c_l — продольная скорость звука в оконном материале. Настоящие эксперименты показали, что относительная разница между смещениями поверхности образца, которые были измерены двумя интерферометрами, не превышала 2% вплоть до максимальных значений объема образца.

Область состояний на плоскости VP , для которой были выполнены измерения термодинамических функций и удельного сопротивления сверхкритического флюида свинца, показана на рис. 2. Ранее было обнаружено, что при нагреве жидкого свинца под давлением 0.5–4 ГПа он испытывает переход металл–неметалл вблизи значения относительного объема $V/V_0 \approx 4$, которое практически совпадает со значением критического объема перехода жидкость–газ [10, 13]. На рис. 2 отмечена эта критическая точка. Как видно на рисунке, для сверхкритических значений объема измерения были проведены при сверхкритических давлениях а, значит, и сверхкритических температурах. Видно также, что исследованная в этой работе область состояний существенно расширена по сравнению с работой [9], в которой были получены данные для интервала объемов $V/V_0 \leq 5$. Чтобы более детально охарактеризовать квазистатические процессы, при которых проводились измерения в настоящих экспериментах, на рис. 2 показаны три изэнтропы, полу-

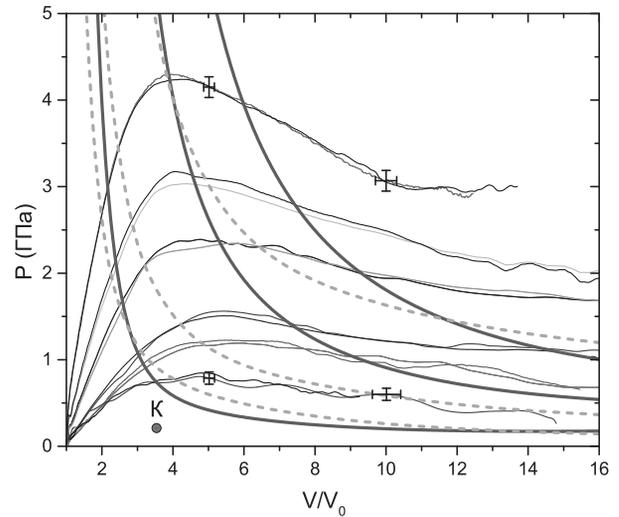


Рис. 2. (В цвете онлайн) Область состояний на плоскости VP , для которой были выполнены измерения термодинамических функций и удельного сопротивления флюида свинца. Семейство линий, которые выходят из нормального состояния, — квазистатические процессы, при которых проводились измерения. Критическая точка (K) и изэнтропы (три толстые сплошные серые линии) получены с помощью УРС из работы [13]. Штриховые серые линии — изотермы $T = 20, 30, 50$ кК, УРС из работы [11]. Крестиками показаны погрешности измерений

ченные с помощью УРС из работы [13]. Для этого УРС характеристические функции определялись на основании всего набора экспериментальных данных по свинцу, включая данные этой работы. На рис. 2 показаны также три изотермы интерполяционного УРС [11]. Как видно на рисунке, в области сверхкритических объемов для экспериментов с давлением $P < 1$ ГПа эти процессы близки к изотермическим, а для экспериментов с давлением $P > 1$ ГПа — к изобарическим.

Представленные в этой работе экспериментальные данные были получены на основании обработки результатов 17 экспериментов. Примерно в половине экспериментов в качестве оконного материала использовался сапфир (монокристаллы сапфира, в которых кристаллографическая ось c была направлена вдоль оси x на рис. 1), а в остальных — кварцевое стекло.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

На рис. 3 представлены полученные в этой работе результаты измерений зависимости коэффициента Грюнайзена от относительного объема. Эти ре-

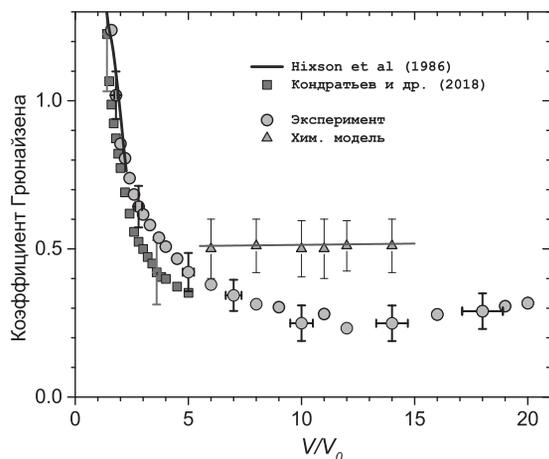


Рис. 3. (В цвете онлайн) Коэффициент Грюнайзена флюида свинца как функция относительного объема. Полученные в этой работе экспериментальные данные (зеленые кружки) сравниваются с результатами измерений из работ [9] (красные квадраты) и [19] (синяя линия), а также с результатами расчетов по ХМП (серые треугольники и аппроксимирующая эти значения прямая линия). Для экспериментов крестики указывают ошибки измерений, а для модели — диапазон изменения коэффициента Грюнайзена для определенного значения относительного объема

зультаты сравниваются с экспериментальными данными работ [9] и [19], а также с результатами расчетов для ХМП. Коэффициент Грюнайзена, который обозначим как γ , определяется формулой

$$\gamma = \left(\frac{\partial PV}{\partial E} \right)_V. \tag{3}$$

Значение коэффициента Грюнайзена для определенного значения удельного объема находилось путем линейной аппроксимации всех пар значений PV, E , полученных для этого значения объема во всех экспериментах настоящей работы. При этом проверялось, что именно линейная аппроксимация (а не многочлен более высокой степени) является наиболее точной.

Из рис. 3 следует, что в интервале объемов $V/V_0 = 6-14$ наша модель предсказывает практически постоянное значение коэффициента Грюнайзена, близкое к значению $2/3$, которое этот коэффициент принимает для одноатомного идеального газа постоянного состава. При этом рассчитанные с помощью ХМП значения (которые определялись для тех же диапазонов значений энергии и давления, что и в эксперименте) в интервале $V/V_0 = 10-14$ почти в два раза превышают измеренные значения. Как видно на рис. 3, разница между рассчитанными и измеренными значениями минимальна при объемах $V/V_0 =$

5–6, для которых наша ХМП, строго говоря, неприменима.

Уменьшение коэффициента Грюнайзена до значений, меньших $2/3$, можно объяснить наличием сильного взаимодействия между заряженными частицами плазмы и ионизацией (изменением состава). Покажем, что для плазмы с сильным кулоновским взаимодействием должно выполняться неравенство $\gamma < 2/3$. Для простоты будем предполагать, что плазма полностью ионизована. Используя выражение для свободной энергии слабонеидеальной классической плазмы [20], находим

$$\gamma = \frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2\pi}}{9} \Gamma^{3/2}, \tag{4}$$

откуда следует, что в этом случае действительно выполняется неравенство $\gamma < 2/3$. Эта формула получена для слабонеидеальной плазмы ($\Gamma \ll 1$), но если ее использовать для оценки коэффициента Грюнайзена при значениях $\Gamma \approx 1$, то получим значения $\gamma \approx 0.3$. Следовательно, можно ожидать, что сильное электростатическое взаимодействие между частицами плазмы приводит к уменьшению коэффициента Грюнайзена до наблюдаемых значений.

Покажем теперь, что для плазмы, в которой происходит ионизация, коэффициент Грюнайзена тоже становится меньше, чем $2/3$. Для простоты рассмотрим идеальную плазму при температурах, когда происходит только однократная ионизация атомов. В этом случае формулы для давления и удельной внутренней энергии плазмы примут относительно простой вид:

$$PV = \frac{R}{A} [1 + \alpha(T)] T, \tag{5}$$

$$E = \frac{3}{2} PV + \frac{N_A}{A} I_1 \alpha(T), \tag{6}$$

где R — газовая постоянная, A — молярная масса газа, N_A — число Авогадро, I_1 — первый потенциал ионизации, α — степень ионизации газа. Степень ионизации определяется согласно соотношению $\alpha = n_e/n_n$, где n_n — полное количество атомов в единице объема (т.е. сумма ионизованных и нейтральных атомов). Подставляя выражения (5), (6) в формулу (3), для коэффициента Грюнайзена получим

$$\gamma = \left[\frac{3}{2} + \frac{I_1}{k} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_V \right]^{-1}. \tag{7}$$

Поскольку степень ионизации растет с ростом температуры при постоянном объеме, второе слагаемое в скобках всегда положительно, а следовательно, γ

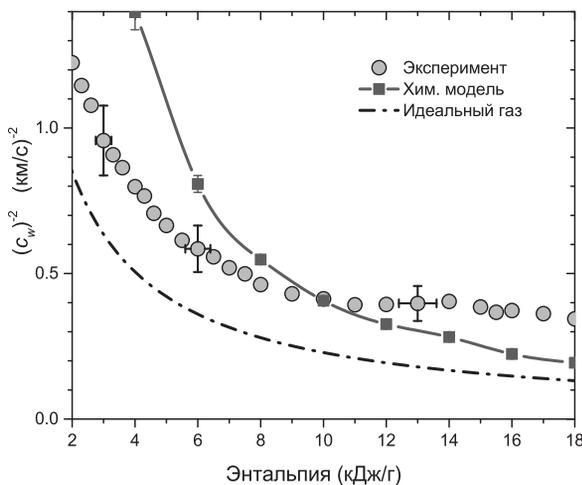


Рис. 4. (В цвете онлайн) Изоэнтальпическая сжимаемость сверхкритического флюида свинца как функция удельной энтальпии. Зеленые кружки — эксперимент, сплошная серая линия со значками — ХМП, штрихпунктирная черная линия — зависимость, рассчитанная для идеального газа. Для экспериментов крестики указывают ошибки измерений, а для модели — диапазон изменения изоэнтальпической сжимаемости при определенном значении энтальпии

$< 2/3$. Таким образом, ионизация тоже приводит к уменьшению коэффициента Грюнайзена по отношению к значению $2/3$. Следует отметить, что при выводе формулы (7) мы пренебрегли вкладом в энергию, который вносят возбуждения атомов, предполагая, что ионизация идет с основного состояния атома. Однако если такой вклад учесть, то заранее очевидно, что он тоже приведет к уменьшению коэффициента Грюнайзена.

Таким образом, тот факт, что измеренные нами значения коэффициента Грюнайзена существенно ниже, чем $2/3$, может говорить как о сильном взаимодействии между частицами плазмы свинца, так и о процессе развитой ионизации. Поскольку для точного вычисления степени ионизации такой плазмы необходимо правильно описывать влияние взаимодействия между частицами на снижение потенциала ионизации, на сдвиги электронных уровней в атомах и на вероятности переходов электронов между атомами, эта задача не может быть решена в рамках ХМП. Интерпретация наблюдаемого здесь поведения коэффициента Грюнайзена плотной плазмы, которая следует из весьма общих соображений, будет дана в следующем разделе.

Рассмотрим еще одну термодинамическую величину, которая непосредственно определяется по результатам настоящих экспериментов и характеризу-

ет механические свойства плазмы. Речь идет о частной производной плотности по давлению при фиксированной энтальпии: $(\partial\rho/\partial P)_W$, где $\rho = V^{-1}$ есть плотность, а буквой W будем обозначать удельную энтальпию. Эту производную, будем называть ее изоэнтальпической сжимаемостью, удобно выразить через изоэнтальпическую скорость звука c_w , которую определим согласно формуле

$$c_w^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_W. \quad (8)$$

Обычная скорость звука c_s (изоэнтропическая) связана с c_w соотношением

$$c_s = (\gamma + 1)^{1/2} c_w. \quad (9)$$

На рис. 4 представлена зависимость изоэнтальпической сжимаемости сверхкритического флюида свинца от удельной энтальпии. Как видно на рис. 4, с точностью до погрешности измерений эта величина является функцией одной переменной — энтальпии и, следовательно, практически не зависит от давления. Рассчитанные с помощью ХМП значения тоже хорошо ложатся на одну линию. Однако значения сжимаемости, полученные с помощью модели, существенно отличаются от результатов измерений: при малых значениях энтальпии эти значения почти в два раза выше измеренных значений, а при значениях энтальпии 16–18 кДж/г они почти в два раза ниже. Заметим, что в интервале $W > 14$ кДж/г рассчитанные значения сжимаемости близки к значениям для идеального газа (при этом энтальпия газа отсчитывается от нормального состояния твердого тела).

Тот факт, что ХМП предсказывает существенно большую сжимаемость при малых значениях энтальпии, которые для этих экспериментов соответствуют малым значениям удельного объема, объясняется, по-видимому, тем, что в этой модели ионы точечные и отталкивание, связанное с их конечным размером, отсутствует. Укажем, что значение энтальпии 5 кДж/г достигалось в этих экспериментах при объемах $V/V_0 = 4-8$. Относительно малые значения изоэнтальпической сжимаемости, которые дает ХМП при больших значениях энтальпии, объясняются тем обстоятельством, что, как будет показано ниже, эта модель почти в два раза завышает температуру плазмы.

Для более детального сравнения результатов измерений с предсказаниями ХМП, на рис. 5 представлены зависимости величины PV от удельной внутренней энергии E . Чтобы не загромождать рисунок,

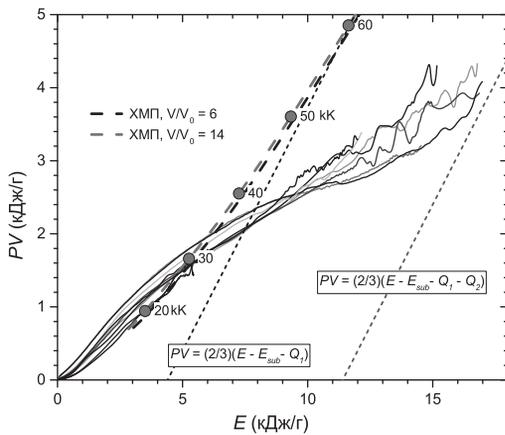


Рис. 5. (В цвете онлайн) Измеренные зависимости величины PV от E (тонкие сплошные линии, которые выходят из начала координат) сравниваются с зависимостями, рассчитанными с помощью ХМП для двух изохор (толстая черная и красная штриховые линии), красными кружками отмечены рассчитанные значения температуры (в кК) на изохоре $V/V_0 = 14$. Тонкие штриховые линии показывают зависимости для однократно ($\alpha = 1$) и двукратно ($\alpha = 2$) ионизованного идеального газа свинца постоянно-го состава

показаны результаты для небольшой группы экспериментов, в которых были достигнуты максимальные значения удельного объема и внутренней энергии. На рис. 5 видно, что существенное отклонение рассчитанных зависимостей от измеренных начинается при значениях энергии 6–7 кДж/г. При больших значениях энергии рассчитанные зависимости становятся близкими к зависимости для однократно ионизованного идеального газа. Укажем для справки значения удельной энергии однократной, двукратной и трехкратной ионизации идеального газа атомов свинца: $Q_1 = 3.44$ кДж/г, $Q_2 = 6.97$ кДж/г и $Q_3 = 14.8$ кДж/г [21]. Используя значение энергии сублимации свинца $E_{sub} = 0.942$ кДж/г [22], для внутренней энергии однократно ионизованного идеального газа свинца с температурой $T = 10 - 30$ кК получим значения энергии $E = 6 - 8$ кДж/г. Эта оценка показывает, что рассчитанные зависимости начинают отклоняться от измеренных тогда, когда начинается двукратная ионизация атомов, и может показаться, что степень ионизации, которую предсказывает модель, не превышает единицы. Однако это не так.

Степень ионизации как функция удельной внутренней энергии плазмы, рассчитанная с помощью ХМП для изохор $V/V_0 = 6$, $V/V_0 = 14$, показана на рис. 6. Видно, что она монотонно растет и

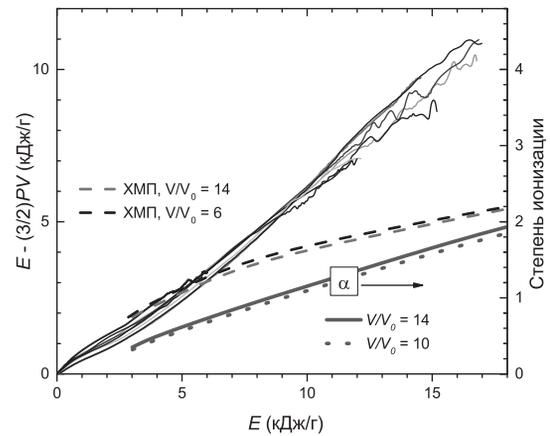


Рис. 6. (В цвете онлайн) Измеренные зависимости величины $E - (3/2)PV$ от удельной внутренней энергии E (тонкие линии, которые выходят из начала координат) сравниваются с вычисленными с помощью ХМП зависимостями для двух изохор (две толстые штриховые линии). Вычисленные с помощью ХМП зависимости степени ионизации плазмы на двух изохорах показаны серой сплошной и серой пунктирной линиями

достигает значения 1.9. На рисунке представлена также зависимость величины $E - (3/2)PV$ от значений внутренней энергии плазмы. Для классической плазмы эта величина равна энергии, которая идет на ионизацию, поскольку величина $(3/2)PV$ есть средняя кинетическая энергия классической системы частиц. Как следует из рис. 6, в интервале энергий 17–18 кДж/г рассчитанные значения величины $E - (3/2)PV$ составляют около 5 кДж/г, что в два раза меньше измеренных значений. Таким образом, ХМП предсказывает почти в два раза меньшие затраты энергии на ионизацию плазмы по сравнению со значениями, полученными в эксперименте. Отсюда следует, что значения температуры плазмы, которые дает эта модель, могут быть сильно завышены.

Для обнаружения эффектов неидеальности плазмы весьма важным является изучение поведения электропроводности [17, 18]. На рис. 7 представлены измеренные в этой работе зависимости удельного сопротивления флюида свинца от удельной внутренней энергии. Приведены также полученные на основании этих экспериментальных данных зависимости удельного сопротивления на изохорах. На рисунке хорошо виден характерный ход изохор вблизи перехода металл–неметалл [10]. Этот переход проявляется в том, что вблизи значения объема $V/V_0 = 2.7$ температурный коэффициент сопротивления меняет знак с положительного на отрицательный и металл переходит

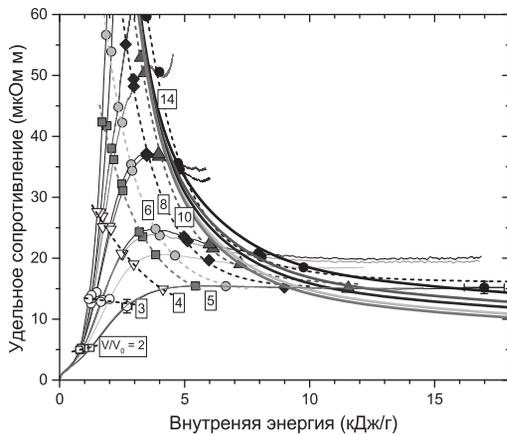


Рис. 7. (В цвете онлайн) Удельное сопротивление свинца как функция удельной внутренней энергии. Тонкие сплошные линии, выходящие из нормального состояния, — зависимости, измеренные в экспериментах этой работы (они обозначены теми же цветами, что и линии этих экспериментов на рис. 2), значки — значения удельного сопротивления на изохорах, полученные в этих экспериментах, тонкие пунктирные линии — аппроксимации этих изохор, толстые сплошные линии — изохоры $V/V_0 = 5, 6, 8, 10, 14$, рассчитанные с помощью ХМП (обозначены теми же цветами, что и соответствующие экспериментальные изохоры)

в сильнокоррелированное металлическое состояние. Когда удельный объем становится больше значения $V/V_0 \approx 4$, этот коэффициент, будучи отрицательным, начинает быстро расти по абсолютной величине с увеличением объема. Оценка критической плотности перехода металл–неметалл для сверхкритического флюида свинца была сделана на основании анализа «холодной кривой», т. е. не зависящей от температуры части внутренней энергии [10]. Как следует из рис. 7, в плазменном состоянии ($V/V_0 > 4$) удельное сопротивление на изохорах монотонно убывает с ростом энергии. Обращает на себя внимание то, что рассчитанные с помощью ХМП зависимости в интервале энергий $E < 5$ кДж/г практически сливаются в одну линию, чего не наблюдается в эксперименте. Заметим также, что при значениях энергии $E > 10$ кДж/г наклоны измеренных изохор существенно меньше чем те, которые демонстрирует модель. Экспериментальные изохоры удельного сопротивления в этом интервале энергий становятся почти горизонтальными. С увеличением относительного объема согласие между измеренными зависимостями и рассчитанными улучшается. Отметим, что расчет удельного сопротивления плазмы свинца для

объемов $V/V_0 = 10 - 20$ на изотерме $T = 20$ кК [23] дает значения удельного сопротивления в интервале $50 - 100$ мкОм·м, которые согласуются с результатами наших расчетов.

Результаты наших измерений давления, удельной внутренней энергии и удельного сопротивления сверхкритического флюида свинца для семейства из семи изохор, представлены в табл. 1 и 2.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как следует из рис. 5, наша ХМП предсказывает довольно большие значения температуры плазмы. Ввиду столь высоких температур возникает вопрос об оценке погрешности настоящих измерений, связанной с потерями энергии на тепловое излучение. Для плазмы свинца плотностью $0.5-2.0$ г/см³ с температурой $1-5$ эВ длина свободного пробега фотонов (усредненная по Росселанду) составляет $\sim 10^{-6}$ см [24, 25], что гораздо меньше толщины образца плазмы в наших экспериментах. Отсюда следует, что эта плазма непрозрачная и тепловое излучение выходит из тонкого слоя вблизи поверхности. Если оценить потери на излучение сверху, предполагая, что температура образца растет так, как предсказывает модель, а его поверхность излучает, как абсолютно черное тело, и вся энергия излучения теряется образцом, то оказывается, что даже для экспериментов с максимальными значениями давления эти потери не превышают 10% от энергии образца вплоть до значения энергии 10 кДж/г. Однако, как видно на рис. 6, при этом значении энергии разница между измеренными и вычисленными значениями величины PV достигает 50% и, следовательно, эту разницу нельзя объяснить потерями энергии на тепловое излучение.

Укажем также, что настоящие эксперименты проводились с образцами, исходная толщина которых различалась в разных экспериментах почти в 3 раза, а в качестве оконного материала использовались сапфир и кварцевое стекло, оптические свойства которых существенно отличаются друг от друга, и поэтому потери энергии на излучение в разных экспериментах, если бы они были заметными, были бы разными. Однако данные, полученные в различных экспериментах, хорошо согласуются друг с другом. Кроме того, измерения объема образца и давления, на точность которых тепловое излучение не влияет, демонстрируют достаточно плавные и монотонные зависимости давления от объема, которые

Таблица 1. Измеренные в этой работе значения давления P (ГПа), удельной внутренней энергии E (кДж/г) и удельного сопротивления σ^{-1} (мкОм·м) сверхкритического флюида свинца на изохорах $V/V_0 = 5, 6, 8, 10, 12, 14, 18$

V/V_0	P	E	σ^{-1}	V/V_0	P	E	σ^{-1}
5	4.16	5.44	15.43	10	3.05	11.55	15.01
5	4.16	5.42	15.38	10	3.07	11.37	15.07
5	3.00	3.84	20.56	10	2.44	7.23	19.06
5	2.32	3.33	23.50	10	1.98	6.13	21.61
5	2.45	3.18	24.28	10	1.98	6.00	22.29
5	2.39	3.34	23.47	10	1.98	6.01	22.31
5	2.37	3.20	23.92	10	1.93	5.88	21.82
5	1.49	2.48	32.15	10	1.93	5.69	23.19
5	1.38	2.54	31.04	10	1.22	3.98	37.67
5	2.36	3.28	23.78	10	1.21	3.96	37.06
5	1.16	2.06	33.78	10	1.03	3.40	50.37
5	1.08	2.08	37.22	10	0.91	3.04	58.98
5	1.21	2.16	36.17	10	0.96	3.26	52.91
5	1.25	2.15	35.95	10	1.00	3.24	50.47
5	0.79	1.84	44.66	10	0.60	2.33	97.96
5	0.84	1.90	41.71	12	2.97	14.22	15.02
5	0.82	1.70	42.32	12	2.92	13.95	15.06
6	3.94	6.65	15.40	12	2.23	8.48	18.63
6	3.98	6.59	15.36	12	1.83	7.12	20.79
6	2.91	4.61	20.43	12	1.85	6.98	21.49
6	2.34	4.00	23.72	12	1.85	6.93	21.25
6	2.36	3.83	24.79	12	1.79	6.81	21.10
6	2.34	3.96	23.85	12	1.79	6.45	22.34
6	2.32	3.85	23.89	12	1.12	4.42	35.55
6	2.28	3.87	24.18	12	1.14	4.38	36.34
6	1.49	2.86	35.40	12	0.92	3.69	51.47
6	1.40	2.90	34.35	12	0.80	3.18	62.81
6	1.19	2.40	41.20	12	0.94	3.38	57.21
6	1.09	2.38	44.45	12	0.79	3.51	51.29
6	1.22	2.51	42.25	12	0.39	2.41	114.37
6	1.21	2.49	41.59	14	2.17	9.91	18.55
6	0.68	2.02	56.85	14	2.13	9.75	18.47
6	0.76	2.07	53.91	14	1.78	8.08	20.21
6	0.75	1.86	56.64	14	1.75	7.95	20.81

Таблица 2. Продолжение Таблицы 1

V/V_0	P	E	σ^{-1}	V/V_0	P	E	σ^{-1}
8	3.54	8.99	15.18	14	1.74	7.84	21.03
8	3.50	8.88	15.22	14	1.72	7.73	20.54
8	2.65	5.97	19.65	14	1.73	7.15	21.95
8	2.15	5.12	22.77	14	1.11	4.81	34.51
8	2.13	4.97	23.53	14	1.13	4.73	35.60
8	2.13	5.04	23.39	14	0.74	3.99	50.57
8	2.17	4.90	22.83	14	0.67	3.27	65.90
8	2.10	4.86	23.31	14	0.79	3.48	59.63
8	1.33	3.47	37.17	14	0.40	2.48	129.89
8	1.32	3.49	36.78	18	2.14	12.16	18.45
8	1.11	2.97	48.15	18	1.67	10.02	19.56
8	0.98	2.78	53.68	18	1.60	9.90	20.12
8	1.07	2.96	49.35	18	1.64	9.67	20.00
8	1.16	2.99	46.80	18	1.67	9.39	20.28
8	0.63	2.21	78.17	18	1.02	5.49	32.82
8	0.63	2.29	75.48	18	1.06	5.29	34.74
8	0.70	2.06	82.64	18	0.55	4.36	50.63

выходят практически на постоянные значения давления при больших значениях объема образца. Если бы потери на тепловое излучение были существенны, то ввиду резкой зависимости интенсивности теплового излучения от температуры можно ожидать более или менее резкого уменьшения давления в образце.

Таким образом, наша ХМП предсказывает существенно меньшие затраты энергии на ионизацию и возбуждение атомов, чем значения, полученные в эксперименте. Отсюда следует, что модель завышает температуру плазмы (для заданных значений V и E). Как видно на рис. 5, при значении энергии 12 кДж/г рассчитанные значения величины PV примерно в 1.7 раза больше, чем измеренные. Если предположить, что во столько же раз завышена кинетическая энергия частиц плазмы, которая пропорциональна $(1 + \alpha)T$, а также учесть, что степень ионизации для нашей модели практически не зависит от плотности и растет с ростом температуры примерно по линейному закону (см. рис. 6), то вместо значения температуры 60 кК, которое предсказывает модель, мы получим 40 кК. Если уменьшить значения температуры плазмы в 1.7 раза (по отношению к значениям, которые дает модель), то

максимальные потери энергии на излучение не превысят 5% вплоть до максимальных измеренных значений энергии. Разумеется, эта оценка температуры не может претендовать на большую точность, однако она согласуется с результатами настоящих экспериментов, в которых не обнаружено заметных потерь энергии.

Имеется еще одно экспериментальное подтверждение правильности этого заключения. Как следует из рис. 4, в интервале энтальпий $W > 8 \text{ кДж/г}$ (которые соответствуют интервалу энергии $E > 6 \text{ кДж/г}$), зависимость изоэнтальпической сжимаемости от удельной энтальпии становится очень пологой. С другой стороны, потери энергии на излучение не могут влиять на эту зависимость, поскольку они не влияют на измерения плотности и давления, а сжимаемость практически не зависит от энтальпии. Поскольку рассчитанные значения сжимаемости для этого интервала энтальпии становятся почти в два раза меньше измеренных, это определенно указывает на то, что модель дает завышенные, примерно в два раза, значения температуры. Отметим, что значения температур, полученные с помощью интерполяционного УРС [11], оказываются тоже завышенными.

В связи со столь существенным различием между результатами экспериментов и предсказаниями ХМП, попытаемся истолковать эти результаты на основании общих соображений, которые не связаны с какой-либо моделью. Для этого воспользуемся теоремой вириала, устанавливающей связь средней кинетической энергии системы частиц, взаимодействующих по закону Кулона, с внутренней энергией и давлением [20]:

$$K = 3PV - E, \quad (10)$$

где K — средняя кинетическая энергия системы. Отметим, что эта теорема справедлива как для классической, так и для квантовой системы частиц. Для классической системы частиц $K = (3/2)NkT$ (N — число частиц в системе). Подставив это выражение в (10) и дифференцируя его по E при фиксированном объеме и числе частиц N , получим

$$\gamma = \frac{1}{3} + \frac{k}{2c_v}, \quad (11)$$

где c_v — теплоемкость, которая приходится на частицу. Отсюда следует, что для классической плазмы постоянного состава имеют место неравенства $1/3 < \gamma \leq 2/3$. Подчеркнем, что этот результат

уже не связан с предположением о слабой неидеальности плазмы, которое использовалось при выводе формулы (4).

Перейдем к случаю, когда число частиц в системе меняется вследствие ионизации. Рассмотрим плазму, состоящую из атомов, ионов и свободных электронов при температурах, когда происходит только однократная ионизация атомов. Кинетическая энергия такой системы частиц состоит не только из кинетической энергии «классических частиц», перечисленных выше, но и «квантовых» частиц — связанных электронов в атомах. Дифференцируя соотношение (10) по энергии при фиксированном объеме, получим

$$(\partial K/\partial E)_V = 3\gamma - 1. \quad (12)$$

Учтем, что приращение кинетической энергии связано не только с возрастанием кинетической энергии «классических» частиц, но и с изменением кинетической энергии электронов, которые переходят из связанных состояний в состояния свободного движения. При этом для подсистемы связанных электронов, поскольку они не дают вклада в давление, теорема вириала принимает вид

$$K_b = -E_b, \quad (13)$$

где индекс « b » указывает, что величина относится к связанным электронам. Следовательно, когда электрон покидает атом и становится свободным, его кинетическая энергия уменьшается на величину энергии связи (потенциал ионизации). Очевидно, что возбуждение связанных электронов тоже приводит к уменьшению кинетической энергии системы. Поэтому полное приращение кинетической энергии равно

$$dK = d\left(\frac{3}{2}NkT\right) - I_1 dN_e - dE_{exc}, \quad (14)$$

где последний член есть вклад от возбужденных состояний. Учитывая, что $N = N_n + N_e$, где N_n есть полное количество атомов, после несложных преобразований получим

$$\left(\frac{\partial K}{\partial E}\right)_V = \frac{N_n}{C_V} \left[\frac{3}{2}k(1+\alpha)\right] - \frac{N_n}{C_V} \left(I_1 - \frac{3}{2}kT\right) \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T}\right)_V - \frac{1}{C_V} \left(\frac{\partial E_{exc}}{\partial T}\right)_V, \quad (15)$$

где $C_V = (\partial E/\partial T)_V$ — теплоемкость плазмы, а степень ионизации $\alpha = N_e/N_n$. Из соотношения (15) следует, что производная $(\partial K/\partial E)_V$ может обращаться в нуль и даже становиться отрицательной,

если второе и третье слагаемые в сумме оказываются больше, чем первое слагаемое.

Согласно соотношению (12), знак производной $(\partial K/\partial E)_V$ определяется только величиной коэффициента Грюнайзена. Следовательно, тот факт, что значения коэффициента Грюнайзена становятся меньше, чем $1/3$, говорит о существенном влиянии на термодинамические свойства плазмы процессов ионизации и возбуждения связанных электронов. Изучение этого вопроса для плотной плазмы сопряжено с трудностями разделения электронов на свободные и связанные, а также с учетом влияния взаимодействия между частицами плазмы на их энергетический спектр [26].

В связи с этим представляет интерес сравнить измеренные зависимости кинетической энергии плазмы от величины внутренней энергии с предсказаниями ХМП. В формуле (10) энергия отсчитывается от состояния, в котором все частицы системы удалены на бесконечность (и находятся там в покое). В эксперименте энергия отсчитывается от нормального состояния твердого тела. Для того чтобы выразить кинетическую энергию через измеряемые величины, заметим, что соотношение (10) должно выполняться и для состояния $T = 0, P = 0$, для которого оно принимает вид

$$K_0 = -E_0, \tag{16}$$

где индекс «0» обозначает состояние при $T = 0, P = 0$. Вычитая равенство (16) из (10), получим

$$K - K_0 = 3PV - (E - E_0). \tag{17}$$

Если пренебречь разницей между энергией в нормальном состоянии и в состоянии $T = 0, P = 0$, то величина $E - E_0$ в правой части (17) будет представлять собой энергию, измеряемую в эксперименте; ниже мы будем по-прежнему обозначать ее буквой E .

На рис. 8 представлено сравнение измеренных и вычисленных с помощью ХМП зависимостей величины $K - K_0$ от энергии E , отсчитываемой от нормального состояния. Тот факт, что кинетическая энергия системы практически не меняется в интервале $E \leq 6$ кДж/г означает, что рост кинетической энергии атомов и свободных электронов компенсируется уменьшением кинетической энергии связанных электронов, которые переходят в возбужденные связанные состояния или в состояния свободного движения. Уменьшение же кинетической энергии с ростом внутренней энергии в интервале $E > 6$ кДж/г говорит о том, что здесь доминирует вклад от ионизации и возбуждений связанных

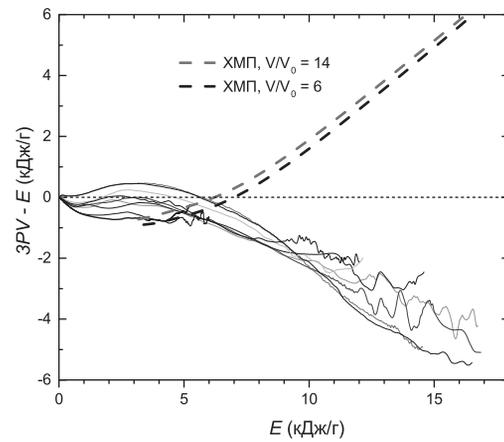


Рис. 8. (В цвете онлайн) Изменение средней кинетической энергии флюида свинца относительно нормального состояния как функция внутренней энергии. Тонкие сплошные линии, которые выходят из начала координат, — зависимости, измеренные в настоящих экспериментах, две толстые штриховые линии — зависимости, вычисленные с помощью ХМП для двух изохор

электронов. Большая разница между рассчитанными и измеренными значениями кинетической энергии плазмы говорит о том, что затраты энергии на ионизацию плазмы и возбуждение связанных электронов для нашей ХМП сильно занижены. Следовательно, можно утверждать, что причина расхождения между результатами модели и эксперимента состоит в недостаточно точном описании связанных состояний. Этот факт отчасти подтверждает вывод о несостоятельности классического описания невырожденной плотной плазмы [27].

Отметим, что значения коэффициента Грюнайзена для металлов и силикатов при давлениях 10–100 ГПа и температурах $T \leq 50$ кК оценивались в экспериментах по ударному сжатию пористых образцов [28]. Для металлов были получены значения $\gamma = 0.6-0.7$, а для силикатов коэффициент Грюнайзена обращался в нуль и даже становился отрицательным. Эта аномалия была истолкована авторами как следствие перехода вещества в аморфное состояние и частичной диссоциации молекул SiO_2 . Такое поведение может быть связано также с размытыми структурными превращениями в жидком состоянии [29].

Остановимся в заключение на поведении удельного сопротивления плазмы свинца. Как известно, одним из теоретически предсказанных эффектов неидеальности плазмы является снижение потенциалов ионизации. Как правило, этот эффект приводит к росту степени ионизации, а с ней и

электропроводности плазмы, и такое увеличение степени ионизации с увеличением плотности иногда называют ионизацией давлением. Этот эффект проявляется в том, что на изотермах удельное сопротивление убывает при уменьшении удельного объема. Теоретические модели предсказывают наличие максимумов на изотермах удельного сопротивления [14, 23, 30], которые отделяют область сильно-неидеальной плазмы от слабонеидеальной. Согласно работе [23], для свинца максимумы на изотермах удельного сопротивления $T = 10$ кК, $T = 20$ кК находятся в интервале объемов $V/V_0 = 10$ –20. Результаты наших экспериментов показывают, что во всей исследованной области состояний для плазмы свинца выполняется неравенство $(\partial\sigma^{-1}/\partial V)_T > 0$, где σ^{-1} — удельное сопротивление (σ — электропроводность). Кратко поясним, откуда следует это утверждение.

Прежде всего заметим, что как видно на рис. 2, в интервале объемов $V/V_0 = 4$ –6 для всех представленных экспериментов давление достигало максимума, т. е. в этом интервале нагрев был близок к изобарическому и, следовательно, температура росла с увеличением объема. На рис. 7 видно, что в этом интервале объемов удельное сопротивление растет либо остается постоянным при увеличении энергии. Но поскольку полная производная удельного сопротивления по объему для некоторого квазистатического процесса на плоскости VT может быть представлена в виде

$$\frac{d\sigma^{-1}}{dV} = \left(\frac{\partial\sigma^{-1}}{\partial T}\right)_V \frac{dT}{dV} + \left(\frac{\partial\sigma^{-1}}{\partial V}\right)_T,$$

а производная $(\partial\sigma^{-1}/\partial T)_V < 0$ (как видно на рис. 7), отсюда следует, что $(\partial\sigma^{-1}/\partial V)_T > 0$. Для экспериментов с давлением 1–2 ГПа (см. рис. 2), для которых процесс нагрева образца в интервале объемов $V/V_0 = 8$ –16 был близок к изобарическому, а удельное сопротивление при этом практически не менялось (см. рис. 7), мы приходим к такому же заключению. Можно показать, что это справедливо для всей исследованной нами области состояний плазмы, но мы не будем останавливаться здесь на этом. Таким образом, для плотной плазмы свинца, которая изучалась в этой работе, «ионизация давлением» играет существенную роль.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены экспериментальные данные по термодинамическим свойствам и удельному сопротивлению плотной плазмы свинца для широкой области

состояний на плоскости VP . Проведено сравнение результатов измерений с предсказаниями химической модели классической плазмы. Показано, что химическая модель почти в два раза занижает затраты энергии на ионизацию плазмы и возбуждение атомов. Приводятся соображения, поясняющие, что причина этого заключается в недостаточно точном описании связанных состояний. Показано, что измерения калорических свойств плотной плазмы совместно с использованием теоремы вириала позволяет установить, насколько правильно теория описывает разделение энергии системы на кинетическую и потенциальную. Показано также, что для изучаемой здесь плотной плазмы свинца эффект «ионизации давлением» играет существенную роль — на изотермах удельное сопротивление уменьшается с уменьшением удельного объема.

Благодарности. Авторы выражают искреннюю благодарность А. С. Шумихину, прочитавшему рукопись статьи и сделавшему несколько ценных замечаний.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. W. DeSilva and A. D. Rakhel, *Contrib. Plasma Phys.* **45**, 236 (2005).
2. A. W. DeSilva and G. B. Vunni, *Phys. Rev. E* **83**, 037402 (2011).
3. J. Cl erouin, P. Noiret, P. Blottiau et al., *Phys. Plasmas* **19**, 082702 (2012).
4. P. Renaudin, C. Blancard, J. Cl erouin et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 075002 (2003).
5. A. W. DeSilva and A. D. Rakhel, *Int. J. Thermophys.* **26**, 1137 (2005).
6. J. Cl erouin, P. Noiret, V.N. Korobenko, and A. D. Rakhel, *Phys. Rev. B* **78**, 224203 (2008).
7. V. N. Korobenko and A. D. Rakhel, *Phys. Rev. B* **88**, 134203 (2013).
8. V. N. Korobenko and A. D. Rakhel, *Phys. Rev. B* **75**, 064208 (2007).
9. А. М. Кондратьев, В. Н. Коробенко, А. Д. Рахель, *ЖЭТФ* **154**, 1168 (2018).
10. А. М. Kondratyev, V.N. Korobenko, and A. D. Rakhel, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 195601 (2022).

11. Л. В. Альтшулер, А. В. Бушман, М. В. Жерноклетов и др., ЖЭТФ **78**, 741 (1980) [L. V. Al'tshuler, A. V. Bushman, M. V. Zhernokletov et al., Sov. Phys. JETP **51**, 373 (1980)].
12. A. D. Rakhel, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 295602 (2018).
13. A. M. Kondratyev and A. D. Rakhel, Phys. Rev. B **107**, 195134 (2023).
14. E. M. Apfelbaum, Contrib. Plasma Phys. **59**, e201800148 (2019).
15. E. M. Apfelbaum, Contrib. Plasma Phys. **61**, e202100063 (2021).
16. A. Yu. Potekhin, G. Chabrier, A. I. Chugunov, E. DeWitt, and F. J. Rogers, Phys. Rev. E **80**, 047401 (2009).
17. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, УФН **191**, 1187 (2021).
18. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, *Thermodynamic Properties of Shock-Compressed Plasmas Based on a Chemical Picture*, in *High-Pressure Shock Compression of Solids VII: Shock Waves and Extreme States of Matter*, Springer, New York (2004), p. 437.
19. W. R. S. Hixson, M. A. Winkler, and J. W. Shaner, Physica B+C **139-140**, 893 (1986).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика: Т. V. Статистическая физика. Ч. I. 5-е изд.* Физматлит, Москва (2002).
21. *Таблицы физических величин*. Справочник, под ред. И. К. Кикоина. Атомиздат, Москва (1976).
22. Л. В. Гурвич, И. В. Вейц, В. А. Медведев и др., *Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х т.* Наука, Москва (1979).
23. A. L. Khomkin and A. S. Shumikhin, High Temp.–High Press. **49**, 143 (2020).
24. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния*, Физматлит, Москва (2000).
25. G. D. Tsakiris and K. Eidmann, J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. **38**, 353 (1987).
26. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ **8**, 413 (1970).
27. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ **6**, 410 (1968).
28. А. Б. Медведев, Р. Ф. Трунин, УФН **182**, 829 (2012).
29. В. В. Бражкин, УФН **182**, 847 (2012).
30. R. Redmer, Phys. Rep. **282**, 35 (1997).

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 165 ЗА 2024 г.

	Вып. Стр.		Вып. Стр.
Козловский В. И. (см. Кривобок В.С.)	6 757	Балаев Д. А., Семёнов С. В., Гохфельд Д. М., Петров М. И. Коллапс малой петли магнитного гистерезиса гранулярного высокотемпературного сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$	2 258
Шнырков О. Д. (см. Григорьев С. В.)	3 438	Баранцев К. А. (см. Волошин Г. В.) ...	5 607
Rostami A. Z. (see Najarsadeghi M.) ...	6 833	Батов И. Е. (см. Жуков А. А.)	3 424
А			
Абрамова Г. М., Фрейдман А. Л., Скоробогатов С. А., Воротынов А. М., Жарков С. М., Молокеев М. С., Панкрац А. И. Спин-флуп-переход, индуцирующий магнитострикционные и магнитодиэлектрические аномалии в монокристалле α -MnS	3 396	Белов И. А., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Вергунова Г. А., Воронин А. Ю., Гаранин С. Г., Головкин С. Ю., Гуськов С. Ю., Демченко Н. Н., Деркач В. Н., Змитренко Н. В., Илюшечкина А. В., Кравченко А. Г., Кузина А. А., Кузьмин И. В., Кучугов П. А., Мюсова А. Е., Рогачев В. Г., Рукавишников А. Н., Соломатина Е. Ю., Стародубцев К. В., Стародубцев П. В., Чугров И. А., Шаров О. О., Яхин Р. А. Генерация плоской стационарной ударной волны при предельно высокой передаче давления твердому веществу от малоплотного поглотителя излучения тераваттного лазерного импульса	4 581
Аверкиев Н. С. (см. Сарычев М. Н.) ..	2 226	Бельков С. А. (см. Белов И. А.)	4 581
Аветисян Г. К., Казарян А. Г., Матевосян Г. Г., Мкртчян Г. Ф. Интенсивная генерация высших гармоник в молекуле фуллерена C180	1 25	Беляев Б. А., Боев Н. М., Скоморохов Г. В., Соловьев П. Н., Лукьяненко А. В., Горчаковский А. А., Подшивалов И. В., Изотов А. В. Особенности анизотропии узких полосок из тонких магнитных пленок, осажденных в постоянном магнитном поле	5 700
Алексеев С.О., Байдерин А.А., Немтинова А.В., Зенин О.И. Нелокальные гравитационные теории и изображения теней черных дыр	4 508	Богомолов А.С. (см. Роговешко В.М.) ..	1 5
Амеличев В. А. (см. Дегтяренко П. Н.)	6 827	Боев Н. М. (см. Беляев Б. А.)	5 700
Аминев Д. Ф. (см. Кривобок В.С.)	6 757	Бондаренко С. В. (см. Белов И. А.) ...	4 581
Апфельбаум Е. М., Кондратьев А. М., Рахель А. Д. Изучение плотной плазмы свинца	6 876	Боровский А. В., Галкин А. Л. Сравнение излучения электрона в линейно и циркулярно поляризованных гауссовых полях	6 767
Арапкина Л.В., Чиж К.В., Ставровский Д.Б., Дубков В.П., Сторожевых М. С., Юрьев В. А. Диффузия атомов водорода из диэлектрических подложек Si_3N_4 в аморфные и поликристаллические пленки Si и Ge	5 647	Быкова А. А. (см. Васьковский В. О.) ..	5 665
Ашитков С. И. (см. Иногамов Н. А.) ..	2 165	В	
Б			
Байдерин А.А. (см. Алексеев С.О.)	4 508	Васев А. В. (см. Путятю М. А.)	1 51
Бакланов А.В. (см. Роговешко В.М.) ..	1 5		
Бакулин А. В. (см. Горев Н. Д.)	6 807		
Балагуров Б. Я. О решении электростатических задач методом собственных функций	4 558		

Васильев А. Д. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Васильев А. Л. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Васильев Р. Б. (см. Клименко Г. А.) ...	3	307
Васьковский В. О., Быкова А. А., Горьковенко А. Н., Москалев М. Е., Лепаловский В. Н. Вариации обменного смещения и магнитная анизотропия пленочных структур на основе антиферромагнетика FeMn	5	665
Вахитов Р. М. (см. Магадеев Е. Б.)	5	673
Вергунова Г. А. (см. Белов И. А.)	4	581
Вещунов М. С. К теории гомогенного зарождения некогерентных включений в твердых растворах	2	214
Волков Ю. О. (см. Тихонов А. М.)	4	486
Волошин Г. В., Баранцев К. А., Литвинов А. Н. Эффекты интерференции различных каналов импульсного возбуждения резонансов когерентного пленения населенностей в ячейках с парами щелочного металла и буферным газом	5	607
Воронин А. А. (см. Иванов А. А.)	2	196
Воронин А. Ю. (см. Белов И. А.)	4	581
Воротинов А. М. (см. Абрамова Г. М.)	3	396

Г

Гавриленко В. И. (см. Козлов Д. В.)	6	840
Гаврилкин С. Ю. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Галкин А. Л. (см. Боровский А. В.)	6	767
Галямин С. Н. Дифракционное излучение на открытом конце круглого волновода с диэлектрическим заполнением	3	326
Гаранин С. Г. (см. Белов И. А.)	4	581
Гаспарян Ю. М. (см. Дегтяренко П. Н.)	4	470
Гафнер С. Л., Гафнер Ю. Я., Редель Л. В., Головенько Ж. В. Моделирование процессов формирования структуры биметаллических нанокластеров Ag–Au	4	516
Гафнер Ю. Я. (см. Гафнер С. Л.)	4	516
Головенько Ж. В. (см. Гафнер С. Л.)	4	516
Головкин С. Ю. (см. Белов И. А.)	4	581
Горев Н. Д., Бакулин А. В., Кулькова С. Е. Механизмы диффузии железа в α -Ti	6	807
Горчаковский А. А. (см. Беляев Б. А.)	5	700
Горьковенко А. Н. (см. Васьковский В. О.)	5	665
Гохфельд Д. М. (см. Балаев Д. А.)	2	258

Грац Ю. В., Спиринов П. А. Казимирово взаимодействие космических струн: массивное поле	1	43
Григорьев П. Д. (см. Песоцкий С. И.)	5	710
Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Яшина Е. Г. Два этапа формирования структуры ветвления листового дерева	3	438
Гришаков К. С. (см. Дегтяренко П. Н.)	4	470
Гудков В. В. (см. Сарычев М. Н.)	2	226
Гусев А. И. (см. Садовников С. И.)	3	374
Гуськов С. Ю. (см. Белов И. А.)	4	581

Д

Дегтяренко П. Н., Гришаков К. С., Писарев А. А., Гаспарян Ю. М. Атомистический анализ рекомбинационной десорбции водорода с поверхности вольфрама	4	470
Дегтяренко П. Н., Скуратов В. А., Васильев А. Л., Овчаров А. В., Петрижик А. М., Семина В. К., Гаврилкин С. Ю., Новиков М. С., Малявина А. Ю., Амеличев В. А., Цветков А. Ю. Влияние облучения ионами Хе с энергией 167 МэВ на сверхпроводящие свойства ВТСП-лент второго поколения	6	827
Демура А. В., Леонтьев Д. С., Лисица В. С. Поляризационные характеристики спектра электродинамического эффекта Штарка	3	341
Демченко Н. Н. (см. Белов И. А.)	4	581
Деркач В. Н. (см. Белов И. А.)	4	581
Дубков В. П. (см. Арапкина Л. В.)	5	647

Е

Егранов А. В. (см. Сарычев М. Н.)	2	226
Ежова К. В. (см. Клименко Г. А.)	3	307
Емельянов Е. А. (см. Путято М. А.)	1	51
Ершов А. В., Карташов И. Н., Кузель М. В. Диэлектрические и плазменно-диэлектрические черенковские усилители субтерагерцового диапазона на релятивистских электронных пучках большой плотности	6	857
Ерыженков А. В. (см. Шикин А. М.)	4	544
Естюнина Т. П. (см. Шикин А. М.)	4	544

Ж

Жариков Е. В. (см. Иванов А. А.)	2	196
Жарков С. М. (см. Абрамова Г. М.)	3	396

Жевстовских И. В. (см. Сарычев М. Н.)	2	226
Жилиев Д. А., Смирнов Б. М. Особенности излучения смеси молекулярных газов	4	494
Жилиева Е. И. (см. Песоцкий С. И.)	5	710
Жуков А. А., Батов И. Е. Различные режимы электронного транспорта в допированных нанопроволоках InAs	3	424
Жуманазаров А. П. (см. Мурзашев А. И.)	1	89
Журавлев К. С. (см. Свит К. А.)	1	65
Жуховицкий Д. И. (см. Перевощиков Е. Е.)	1	73

З

Заварцев Ю. Д. (см. Тарасов В. Ф.)	2	250
Заворницын Р. С. (см. Устинов В. В.)	1	114
Зазымкина Д. А. (см. Кривобок В.С.)	6	757
Зайцев Н. Л. (см. Шикин А. М.)	4	544
Зверев В. Н. (см. Песоцкий С. И.)	5	710
Зенин О.И. (см. Алексеев С.О.)	4	508
Змитренко Н. В. (см. Белов И. А.)	4	581

И

Иванов А. А., Ланин А. А., Воронин А. А., Жариков Е. В., Федотов А. Б. Стабилизация генерации фемтосекундных импульсов в лазере с пассивной синхронизацией мод на кристалле $Mg_2SiO_4:Cr^{4+}$ за счет спектральной разгрузки резонатора в боковые компоненты Келли	2	196
Изотов А. В. (см. Беляев Б. А.)	5	700
Илюшечкина А. В. (см. Белов И. А.)	4	581
Иногамов Н. А., Хохлов В. А., Ромашевский С. А., Петров Ю. В., Овчинников М. А., Ашитков С. И. Сильное возбуждение электронной подсистемы золота ультракоротким лазерным импульсом и процессы релаксации около температуры плавления	2	165
Исмагилов Р. Р. (см. Логинов А. Б.)	3	355

К

Казарян А. Г. (см. Аветисян Г. К.)	1	25
Камкова Т. Н. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Карпешин Ф. Ф., Тржасковская М. Б. Резонансная оптическая накачка изомера ^{229}Th с энергией 8 эВ	2	145
Картавых Н. Н. (см. Некрасов О. О.)	6	848

Карташов И. Н. (см. Ершов А. В.)	6	857
Карташов И. Н., Кузелев М. В. Электродинамика плазменного соленоида и электромагнитные свойства индуктивного разряда	5	725
Клещ В. И., Образцов А. Н. Электромеханические автоколебательные системы с гибкими автоэлектронными эмиттерами	6	776
Клименко Г. А., Козлова М. В., Ежова К. В., Саиджонов Б. М., Васильев Р. Б., Смирнов А. М. Влияние концентрации нанопластинок CdSe в коллоидном растворе на нелинейное изменение поглощения	3	307
Князев Ю. В. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Кобелев Н. П. (см. Кончаков Р. А.)	3	367
Ковалев А. Т. (см. Ковалева И. Х.)	6	870
Ковалева И. Х., Ковалев А. Т. Модель солитонной турбулентности высокочастотных флуктуаций частично замагниченной плазмы	6	870
Козачек В. В. (см. Ярыгина Е. А.)	1	98
Козлов Д. В., Румянцев В. В., Янцер А. А., Морозов С. В., Гавриленко В. И. Захват электронов и дырок на состоянии вакансий ртути с испусканием одиночного оптического фонона при рекомбинации Шокли – Рида – Холла в узкозонных твердых растворах HgCdTe	6	840
Козловский А. В. Эволюция свойств операторов фазы электромагнитного поля в моделях Раби и Джейнса – Каммингса	5	618
Козлова М. В. (см. Клименко Г. А.)	3	307
Колоколов И. В., Лебедев В. В. Корреляции флуктуаций течения, возбуждаемых случайной силой на фоне сдвигового потока	1	128
Конарев Д. В. (см. Кузьмин А. В.)	4	527
Кондратьев А. М. (см. Апфельбаум Е. М.)	6	876
Кончаков Р. А., Макаров А. С., Кобелев Н. П., Хоник В. А. Характеристики дефектов и энтропия смешения в высокоэнтропийных сплавах системы FeNiCrCoCu	3	367
Конюхов А. В. Термодинамический критерий нейтральной устойчивости ударных волн в гидродинамике и его следствия	4	589
Коростелин Ю. В. (см. Кривобок В.С.)	6	757
Космачев О. А. (см. Ярыгина Е. А.)	1	98
Костенко М. Г. (см. Садовников С. И.)	3	374

Котова Л. В., Кочерешко В. П. Особенности поляризованной люминесценции неоднородного ансамбля локализованных экситонов	6	818
Кочерешко В. П. (см. Котова Л. В.) ..	6	818
Кравченко А. Г. (см. Белов И. А.)	4	581
Красиков А. А. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Кривобок В.С., Аминев Д. Ф., Зазымкина Д. А., Ушаков В. В., Нарич А. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В. Роль нефелоксетического эффекта для иона Fe^{2+} в матрицах селенида цинка и теллурида кадмия	6	757
Криницина Т. П. (см. Устинов В. В.) ..	1	114
Куватов М. М. (см. Логинов А. Б.)	3	355
Кузелев М. В. (см. Ершов А. В.)	6	857
Кузелев М. В. (см. Карташов И. Н.) ..	5	725
Кузина А. А. (см. Белов И. А.)	4	581
Кузьмин А. В., Хасанов С. С., Конарев Д. В. Электронная структура и ян-теллеровские деформации в фуллереновом комплексе $C_{60}^{\bullet-}$ -MDABCO ⁺ -TPC-I	4	527
Кузьмин И. В. (см. Белов И. А.)	4	581
Кулагин В. В., Цвентух М. М. О воздействии потока ионов гелиевой плазмы повышенной энергии на наноструктуру вольфрама	5	742
Кулькова С. Е. (см. Горев Н. Д.)	6	807
Кунцевич А. Ю. (см. Шуплецов А. В.)	4	572
Кутузов М. С. (см. Цебро В. И.)	2	266
Кучугов П. А. (см. Белов И. А.)	4	581

Л

Ланин А. А. (см. Иванов А. А.)	2	196
Ларионов Н. В. Влияние фазы ионизирующего предельно короткого лазерного импульса на образование квантовых вихрей в плотности распределения фотоэлектронов	3	317
Лебедев В. В. (см. Колоколов И. В.) ..	1	128
Леонтьев Д. С. (см. Демура А. В.)	3	341
Лепаловский В. Н. (см. Васьковский В. О.)	5	665
Лисица В. С. (см. Демура А. В.)	3	341
Литвинов А. Н. (см. Волошин Г. В.) ...	5	607

Логинов А. Б., Исмагилов Р. Р., Федотов П. В., Сапков И. В., Куватов М. М., Логинов Б. А., Образцова Е. Д., Образцов А. Н. Изменение свойств пленок дихалькогенидов переходных металлов на различных стадиях их формирования в процессе химического газофазного осаждения	3	355
Логинов Б. А. (см. Логинов А. Б.)	3	355
Лукашевич В. В. Нарушение симметрии при рассеянии нейтронов	2	207
Лукоянов А. В. (см. Садовников С. И.)	3	374
Лукьяненко А. В. (см. Беляев Б. А.) ..	5	700
Любовский Р. Б. (см. Песоцкий С. И.)	5	710

М

Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М. Влияние однородного электрического поля на вихреподобные магнитные структуры в перфорированных пленках	5	673
Магницкий С. А. (см. Фроловцев Д. Н.)	1	32
Магомедов М. А. (см. Рамазанов М. К.)	3	404
Макаров А. С. (см. Кончаков Р. А.) ...	3	367
Макаров В. А. (см. Рыжиков П. С.) ...	2	152
Макаров Г. Н., Петин А. Н. Эффективная изотопно-селективная лазерная инфракрасная многофотонная диссоциация молекул $^{11}BCl_3$ в смеси с сенсбилизатором и акцептором радикалов SF_6	1	14
Максимова И. К. (см. Устинов В. В.) .	1	114
Максимычев А. В., Меньшиков Л. И., Меньшиков П. Л. Молекулы из отталякивающих атомов, адсорбированных на поверхности и нити	6	784
Малявина А. Ю. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Матевосян Г. Г. (см. Аветисян Г. К.) ..	1	25
Матюнина Я. Ю. (см. Ярыгина Е. А.)	1	98
Меньшенин В. В. Ферромагнитный порядок в вандерваальсовом соединении Fe_3GeTe_2	3	389
Меньшиков Л. И. (см. Максимычев А. В.)	6	784
Меньшиков П. Л. (см. Максимычев А. В.)	6	784
Меньшикова С. Г., Щелкачев Н. М. Локальная структура и затвердевание стеклообразующего расплава $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ под высоким давлением: эксперимент, моделирование, машинное обучение	5	655
Миляев М. А. (см. Устинов В. В.)	1	114

Миранцев Л. В. Поведение смесей активных и пассивных нематиков в ограниченной двумерной круглой области	5	718
Мкртчян Г. Ф. (см. Аветисян Г. К.) ...	1	25
Могилюк Т. И. (см. Песоцкий С. И.) ..	5	710
Молокеев М. С. (см. Абрамова Г. М.) .	3	396
Морозов С. В. (см. Козлов Д. В.)	6	840
Москалев М. Е. (см. Васьяковский В. О.)	5	665
Мурзашев А. И., Жуманазаров А. П. Энергетический спектр и оптическое поглощение соединений фуллеренов C ₅₀ и C ₇₀ с атомами галогенов Cl и Br	1	89
Муртазаев А. К. (см. Рамазанов М. К.)	3	404
Мюсова А. Е. (см. Белов И. А.)	4	581

Н

Нариц А. А. (см. Кривобок В.С.)	6	757
Наумова Л. И. (см. Устинов В. В.)	1	114
Некрасов О. О., Картавых Н. Н. Нелинейные колебания слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле в рамках маломодового приближения	6	848
Немтинова А.В. (см. Алексеев С.О.) ..	4	508
Николаев Е. Г. (см. Цебро В. И.)	2	266
Новиков М. С. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Нунупаров М. С. (см. Шуплецов А. В.)	4	572

О

Образцов А. Н. (см. Клец В. И.)	6	776
Образцов А. Н. (см. Логинов А. Б.) ...	3	355
Образцова Е. Д. (см. Логинов А. Б.) ..	3	355
Овчаров А. В. (см. Дегтяренко П. Н.) .	6	827
Овчинников М. А. (см. Иногамов Н. А.)	2	165
Орленко Е. В., Орленко Ф. Е. Когерентные состояния в тепловом квантовом транспорте	5	627
Орленко Ф. Е. (см. Орленко Е. В.)	5	627
Офицерова Н. Ю. (см. Сарычев М. Н.)	2	226

П

Павлова А. Ю. (см. Устинов В. В.)	1	114
Павловский М. С. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Панкрац А. И. (см. Абрамова Г. М.) ...	3	396
Перевощиков Е. Е., Жуховицкий Д. И. Нуклеация в неидеальном быстро охлаждающемся паре	1	73

Песоцкий С. И., Любовский Р. Б., Зверев В. Н., Григорьев П. Д., Могилюк Т. И., Торунова С. А., Жилыева Е. И. Влияние внешнего давления на поведение металлической фазы органического квазидвумерного проводника k -(BEDT-TTF) ₂ Hg(SCN) ₂ Cl. Вклад корреляционных эффектов	5	710
Петин А. Н. (см. Макаров Г. Н.)	1	14
Петржик А. М. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Петров М. И. (см. Балаев Д. А.)	2	258
Петров Ю. В. (см. Иногамов Н. А.)	2	165
Петрушков М. О. (см. Путято М. А.) .	1	51
Писарев А. А. (см. Дегтяренко Н. Н.) .	4	470
Подшивалов И. В. (см. Беляев Б. А.) .	5	700
Пономарева А. В. Влияние легирования кремнием на термодинамические, магнитные и упругие свойства ОЦК-сплавов Fe-Cr	3	410
Преображенский В. В. (см. Путято М. А.)	1	51
Приходько К. Е. (см. Шуплецов А. В.)	4	572
Проглядо В. В. (см. Устинов В. В.)	1	114
Путято М. А., Емельянов Е. А., Петрушков М. О., Васев А. В., Семягин Б. Р., Преображенский В. В. Молекулярно-лучевая эпитаксия твердого раствора GaP _x As _{1-x} на вицинальной поверхности (001): кинетическая модель формирования состава в анионной подрешетке	1	51
Пшеничный К. А. (см. Григорьев С. В.)	3	438

Р

Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А., Ризванова Т. Р. Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с фрустрациями на решетке кагоме	3	404
Рахель А. Д. (см. Апфельбаум Е. М.) .	6	876
Редель Л. В. (см. Гафнер С. Л.)	4	516
Ризванова Т. Р. (см. Рамазанов М. К.)	3	404
Рогачев В. Г. (см. Белов И. А.)	4	581
Роговешко В.М., Богомолов А.С., Бакланов А.В. Определение энергии связи и структуры ван-дер-ваальсовых комплексов кислорода с ксеноном Xe _n -O ₂ (n = 1, 2)	1	5
Ромашевский С. А. (см. Иногамов Н. А.)	2	165

Рубан В. П. Неустойчивость Кельвина–Гельмгольца в нелинейной оптике	2	294
Рукавишников А. Н. (см. Белов И. А.)	4	581
Румянцев В. В. (см. Козлов Д. В.)	6	840
Рыжиков П. С., Макаров В. А. Энергия, импульс и угловой момент электромагнитного поля в среде с нелокальностью оптического отклика при вырожденном по частоте нелинейном взаимодействии волн	2	152

С

Садаков А. В. (см. Цебро В. И.)	2	266
Садовников С. И., Костенко М. Г., Гусев А. И., Лукоянов А. В. Предсказание низкотемпературных фаз сульфида серебра, производных от аргентита	3	374
Саиджонов Б. М. (см. Клименко Г. А.)	3	307
Сапков И. В. (см. Логинов А. Б.)	3	355
Сарычев М. Н., Офицерова Н. Ю., Жевстовских И. В., Егранов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В. Квантовая динамика янтеллеровских комплексов $Cr^{2+}F_8^-$ в кристалле $CdF_2 : Cr$	2	226
Свит К. А., Журавлев К. С. Исследование анизотропии формы нанокристаллов методом EXAFS-спектроскопии	1	65
Семёнов С. В. (см. Балаев Д. А.)	2	258
Семенов С. В. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Семина В. К. (см. Дегтяренко П. Н.) ..	6	827
Скоморохов Г. В. (см. Беляев Б. А.) ..	5	700
Скоробогатов С. А. (см. Абрамова Г. М.)	3	396
Скоробогатов С. А. (см. Шайхутдинов К. А.)	5	685
Скуратов В. А. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827
Смирнов А. М. (см. Клименко Г. А.) ..	3	307
Смирнов Б. М. (см. Жилиев Д. А.) ...	4	494
Соболевский О. А. (см. Цебро В. И.) ..	2	266
Соловаров Н. К. (см. Тарасов В. Ф.) ..	2	250
Соловьев П. Н. (см. Беляев Б. А.)	5	700
Соломатина Е. Ю. (см. Белов И. А.) ..	4	581
Спирин П. А. (см. Грац Ю. В.)	1	43
Ставровский Д. Б. (см. Арапкина Л. В.)	5	647
Стародубцев К. В. (см. Белов И. А.) ..	4	581
Стародубцев П. В. (см. Белов И. А.) ..	4	581
Сторожевых М. С. (см. Арапкина Л. В.)	5	647
Суриков В. Т. (см. Сарычев М. Н.)	2	226

Суслов И. М. Распределение фаз в одномерной локализации и фазовые переходы в одномодовых волноводах	2	233
Суханов А. А. (см. Тарасов В. Ф.)	2	250

Т

Тарасов А. В. (см. Шикин А. М.)	4	544
Тарасов В. Ф., Соловаров Н. К., Суханов А. А., Заварцев Ю. Д. Магнитоэлектрическое возбуждение резонансных переходов в электронной спиновой системе примесных ионов ^{167}Er в ортосиликате иттрия (Y_2SiO_5)	2	250
Тихонов А. М., Волков Ю. О. Диффузное рентгеновское рассеяние на пленке 1-додеканола на границе н-гексан–вода ...	4	486
Торунова С. А. (см. Песочкий С. И.) ..	5	710
Тржасковская М. Б. (см. Карпешин Ф. Ф.)	2	145

У

Устинов В. В., Наумова Л. И., Заборницын Р. С., Ясюевич И. А., Максимова И. К., Криницина Т. П., Павлова А. Ю., Проглядо В. В., Миляев М. А. Размерные эффекты в магнитосопротивлении нанослоев тантала со спинорбитальным взаимодействием	1	114
Ушаков В. В. (см. Кривобок В. С.)	6	757

Ф

Федотов А. Б. (см. Иванов А. А.)	2	196
Федотов П. В. (см. Логинов А. Б.)	3	355
Филиппов А. В. Экранированное и вандер-Ваальсовское взаимодействие в пылевой плазме и электролитах	2	276
Фрейдман А. Л. (см. Абрамова Г. М.) ..	3	396
Фридман Ю. А. (см. Ярыгина Е. А.) ..	1	98
Фроловцев Д. Н., Магницкий С. А. Спонтанное параметрическое рассеяние в двусосных нелинейно-оптических кристаллах: особенности состояния поляризации излучения	1	32

Х

Хасанов С. С. (см. Кузьмин А. В.)	4	527
Хоник В. А. (см. Кончаков Р. А.)	3	367
Хохлов В. А. (см. Иногамов Н. А.)	2	165

Ц			
Цвентух М. М. (см. Кулагин В. В.) ...	5	742	
Цветков А. Ю. (см. Дегтяренко П. Н.)	6	827	
Цebro В. И., Николаев Е. Г., Кутузов М. С., Садаков А. В., Соболевский О. А. Сильное отрицательное магнитосопротивление и прыжковый транспорт в графенизированных нематических аэрогелях	2	266	
Ч			
Чернов С. В. Поляризационные свойства черных дыр и кротовых нор	6	788	
Чиж К. В. (см. Арапкина Л. В.)	5	647	
Чугров И. А. (см. Белов И. А.)	4	581	
Ш			
Шайхутдинов К. А., Скоробогатов С. А., Князев Ю. В., Камкова Т. Н., Васильев А. Д., Семенов С. В., Павловский М. С., Красиков А. А. Управление температурой спин-переориентационного перехода в монокристаллах ортоферритов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$	5	685	
Шаров О. О. (см. Белов И. А.)	4	581	
Шикин А. М., Естюнина Т. П., Ерыженков А. В., Зайцев Н. Л., Тарасов А. В. Исследование взаимосвязи топологического фазового перехода, аксионо-подобного состояния и магнитоэлектрического эффекта в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi_2Te_4	4	544	
Шуплецов А. В., Нунупаров М. С., Приходько К. Е., Кунцевич А. Ю. Сильно нелинейный эффект Холла в макроскопически неоднородной двумерной системе	4	572	
Щ			
Щелкачев Н. М. (см. Меньшикова С. Г.)	5	655	
Ю			
Юрьев В. А. (см. Арапкина Л. В.)	5	647	
Я			
Янцер А. А. (см. Козлов Д. В.)	6	840	
Ярыгина Е. А., Козачек В. В., Матюнина Я. Ю., Космачев О. А., Фридман Ю. А. Динамические и статические свойства негеизенберговского анизотропного антиферромагнетика при ненулевой температуре	1	98	
Ясюевич И. А. (см. Устинов В. В.) ...	1	114	
Яхин Р. А. (см. Белов И. А.)	4	581	
Яшина Е. Г. (см. Григорьев С. В.)	3	438	
А			
Avakyants A. A. (see Orlova N. N.)	4	536	
С			
Семягин Б. Р. (см. Пулято М. А.)	1	51	
D			
Delibašić Marković H., Petrović V., Petrović I. Non-sequential double ionization of the alkaline earth atoms with a near-single cycle laser pulse in a linearly polarized laser field	2	191	
Deviatov E. V. (see Orlova N. N.)	4	536	
Dokuchaev V. I., Prokopenk K. E. Generalized Einstein–Rosen bridge inside black holes	6	800	
F			
Fouladi A. A. (see Najarsadeghi M.)	6	833	
K			
Kolesnikov N. N. (see Orlova N. N.)	4	536	
N			
Najarsadeghi M., Fouladi A. A., Rostami A. Z., Pahlavan A. Quantum transport through the graphene-silicene nanoribbons junction	6	833	
O			
Orlova N. N., Avakyants A. A., Timonina A. V., Kolesnikov N. N., Deviatov E. V. Ferromagnetic response of thin NiI_2 flakes up to room temperatures	4	536	
P			
Pahlavan A. (see Najarsadeghi M.)	6	833	
Petrović I. (see Delibašić Marković H.) ...	2	191	
Petrović V. (see Delibašić Marković H.) ..	2	191	

Prokopen K. E. (see Dokuchaev V. I.) ... 6 800

T

Timonina A. V. (see Orlova N. N.) 4 536

V

Verbitskiy A., Yulin A. Excitation of Wannier – Stark states in a chain of coupled optical resonators with linear gain and nonlinear losses 4 455

Y

Yulin A. (see Verbitskiy A.) 4 455

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 165 ЗА 2024 г.

	Вып.	Стр.		Вып.	Стр.
1. Атомы, молекулы, оптика					
1.1 Общие вопросы квантовой механики					
Поляризационные характеристики спектра электродинамического эффекта Штарка. Демура А. В., Леонтьев Д. С., Лисица В. С.	3	341	Сильное возбуждение электронной подсистемы золота ультракоротким лазерным импульсом и процессы релаксации около температуры плавления. Иногамов Н. А., Хохлов В. А., Ромашевский С. А., Петров Ю. В., Овчинников М. А., Ашитков С. И.	2	165
Молекулы из отталкивающихся атомов, адсорбированных на поверхности и нити. Максимычев А. В., Меньшиков Л. И., Меньшиков П. Л.	6	784	Дифракционное излучение на открытом конце круглого волновода с диэлектрическим заполнением. Галямин С. Н.	3	326
1.4 Структура и динамика атомов и молекул					
Роль нефелоксетического эффекта для иона Fe^{2+} в матрицах селенида цинка и теллурида кадмия. Кривобок В. С., Аминева Д. Ф., Зазымкина Д. А., Ушаков В. В., Нарич А. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В.	6	757	Атомистический анализ рекомбинационной десорбции водорода с поверхности вольфрама. Дегтяренко Н. Н., Гришаков К. С., Писарев А. А., Гаспарян Ю. М.	4	470
1.5 Столкновения атомов и молекул, источники излучения					
Определение энергии связи и структуры ван-дер-ваальсовых комплексов кислорода с ксеноном Xe_n-O_2 ($n = 1, 2$). Роговешко В. М., Богомолов А. С., Бакланов А. В.	1	5	Диффузное рентгеновское рассеяние на пленке 1-додеканаола на границе н-гексана-вода. Тихонов А. М., Волков Ю. О.	4	486
Особенности излучения смеси молекулярных газов. Жильев Д. А., Смирнов Б. М.	4	494	1.7 Взаимодействие атомов и молекул с электромагнитным полем, квантовая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика		
Электромеханические автоколебательные системы с гибкими автоэлектронными эмиттерами. Клещ В. И., Образцов А. Н.	6	776	Эффективная изотопно-селективная лазерная инфракрасная многофотонная диссоциация молекул $^{11}BCl_3$ в смеси с сенситизатором и акцептором радикалов SF_6 . Макаров Г. Н., Петин А. Н.	1	14
1.6 Взаимодействие фотонов, электронов, атомов и молекул с конденсированными телами и поверхностями					
Интенсивная генерация высших гармоник в молекуле фуллерена C_{180} . Аветисян Г. К., Казарян А. Г., Матевосян Г. Г., Мкртчян Г. Ф.	1	25	Спонтанное параметрическое рассеяние в двусных нелинейно-оптических кристаллах: особенности состояния поляризации излучения. Фроловцев Д. Н., Магницкий С. А.	1	32
			Резонансная оптическая накачка изомера ^{229}Th с энергией 8 эВ. Карпешин Ф. Ф., Гржасковская М. Б.	2	145
			Энергия, импульс и угловой момент электромагнитного поля в среде с нелокальностью оптического отклика при вырожденном по частоте нелинейном взаимодействии волн. Рыжиков П. С., Макаров В. А.	2	152

Non-sequential double ionization of the alkaline earth atoms with a near-single cycle laser pulse in a linearly polarized laser field. <i>Delibašić Marković H., Petrović V., Petrović I.</i>	2	191	1.8 Классическая электродинамика
Стабилизация генерации фемтосекундных импульсов в лазере с пассивной синхронизацией мод на кристалле $Mg_2SiO_4:Cr^{4+}$ за счет спектральной разгрузки резонатора в боковые компоненты Келли. <i>Иванов А. А., Ланин А. А., Воронин А. А., Жариков Е. В., Федотов А. Б.</i>	2	196	Стабилизация генерации фемтосекундных импульсов в лазере с пассивной синхронизацией мод на кристалле $Mg_2SiO_4:Cr^{4+}$ за счет спектральной разгрузки резонатора в боковые компоненты Келли. <i>Иванов А. А., Ланин А. А., Воронин А. А., Жариков Е. В., Федотов А. Б.</i>
Влияние концентрации нанопластинок CdSe в коллоидном растворе на нелинейное изменение поглощения. <i>Клименко Г. А., Козлова М. В., Ежова К. В., Саиджонов Б. М., Васильев Р. Б., Смирнов А. М.</i>	3	307	2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика
Влияние фазы ионизирующего предельно короткого лазерного импульса на образование квантовых вихрей в плотности распределения фотоэлектрона. <i>Ларионов Н. В.</i>	3	317	2.2 Физика адронов и КХД
Поляризационные характеристики спектра электродинамического эффекта Штарка. <i>Демура А. В., Леонтьев Д. С., Лисица В. С.</i>	3	341	Нарушение симметрии при рассеянии нейтронов. <i>Лукашевич В. В.</i>
Excitation of Wannier – Stark states in a chain of coupled optical resonators with linear gain and nonlinear losses. <i>Verbitskiy A., Yulin A.</i>	4	455	2.4 Гравитация и астрофизика
Эффекты интерференции различных каналов импульсного возбуждения резонансов когерентного пленения населенностей в ячейках с парами щелочного металла и буферным газом. <i>Волошин Г. В., Баранцев К. А., Литвинов А. Н.</i>	5	607	Казимирово взаимодействие космических струн: массивное поле. <i>Грац Ю. В., Спириг П. А.</i>
Эволюция свойств операторов фазы электромагнитного поля в моделях Раби и Джейнса – Каммингса. <i>Козловский А. В.</i>	5	618	Нелокальные гравитационные теории и изображения теней черных дыр. <i>Алексеев С. О., Байдерин А. А., Немтинова А. В., Зенин О. И.</i>
Сравнение излучения электрона в линейно и циркулярно поляризованных гауссовых полях. <i>Боровский А. В., Галкин А. Л.</i>	6	767	Поляризационные свойства черных дыр и кротовых нор. <i>Чернов С. В.</i>
			Generalized Einstein – Rosen bridge inside black holes. <i>Dokuchaev V. I., Prokopenk K. E.</i>
			3. Твердые тела и жидкости
			3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения
			Исследование анизотропии формы нанокристаллов методом EXAFS-спектроскопии. <i>Свит К. А., Журавлев К. С.</i>
			Энергетический спектр и оптическое поглощение соединений фуллеренов C_{50} и C_{70} с атомами галогенов Cl и Br. <i>Мурзаев А. И., Жуманазаров А. П.</i>
			Квантовая динамика ян-теллеровских комплексов $Cr^{2+}F_8^-$ в кристалле $CdF_2 : Cr$. <i>Сарычев М. Н., Офицерова Н. Ю., Жевстовских И. В., Егранов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В.</i>

Моделирование процессов формирования структуры биметаллических нанокластеров Ag–Au. <i>Гафнер С. Л., Гафнер Ю. Я., Редель Л. В., Головенько Ж. В.</i>	4	516
Электронная структура и ян-теллеровские деформации в фуллереновом комплексе $C_{60}^{\bullet-}$ –MDAVCO ⁺ –TPC-I. <i>Кузьмин А. В., Хасанов С. С., Конарев Д. В.</i>	4	527
Особенности поляризованной люминесценции неоднородного ансамбля локализованных экситонов. <i>Котова Л. В., Кочерешко В. П.</i>	6	818

3.2 Структура, механические свойства, дефекты, рост кристаллов

Молекулярно-лучевая эпитаксия твердого раствора GaP_xAs_{1-x} на вицинальной поверхности (001): кинетическая модель формирования состава в анионной подрешетке. <i>Путьято М. А., Емельянов Е. А., Петрушков М. О., Васев А. В., Семягин Б. Р., Преображенский В. В.</i>	1	51
Энергетический спектр и оптическое поглощение соединений фуллеренов C_{50} и C_{70} с атомами галогенов Cl и Br. <i>Мурзаев А. И., Жуманазаров А. П.</i>	1	89
К теории гомогенного зарождения некогерентных включений в твердых растворах. <i>Вещунов М. С.</i>	2	214
Изменение свойств пленок дихалькогенидов переходных металлов на различных стадиях их формирования в процессе химического газофазного осаждения. <i>Логинов А. Б., Исмагилов Р. Р., Федотов П. В., Сапков И. В., Куватов М. М., Логинов Б. А., Образцова Е. Д., Образцов А. Н.</i>	3	355
Предсказание низкотемпературных фаз сульфида серебра, производных от арсенида. <i>Садовников С. И., Костенко М. Г., Гусев А. И., Лукьянов А. В.</i>	3	374
Электронная структура и ян-теллеровские деформации в фуллереновом комплексе $C_{60}^{\bullet-}$ –MDAVCO ⁺ –TPC-I. <i>Кузьмин А. В., Хасанов С. С., Конарев Д. В.</i>	4	527
Диффузия атомов водорода из диэлектрических подложек Si_3N_4 в аморфные и поликристаллические пленки Si и Ge. <i>Арапкина Л. В., Чиж К. В., Ставровский Д. Б., Дубков В. П., Сторожевых М. С., Юрвев В. А.</i>	5	647

Локальная структура и затвердевание стеклообразующего расплава $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ под высоким давлением: эксперимент, моделирование, машинное обучение. <i>Меньшикова С. Г., Щелкачев Н. М.</i>	5	655
Механизмы диффузии железа в α -Ti. <i>Горев Н. Д., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.</i>	6	807

3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей

Нуклеация в неидеальном быстро охлаждающемся паре. <i>Перевоицков Е. Е., Жуховицкий Д. И.</i>	1	73
Когерентные состояния в тепловом квантовом транспорте. <i>Орленко Е. В., Орленко Ф. Е.</i>	5	627
Локальная структура и затвердевание стеклообразующего расплава $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ под высоким давлением: эксперимент, моделирование, машинное обучение. <i>Меньшикова С. Г., Щелкачев Н. М.</i>	5	655

3.5 Низкоразмерные системы (структура и т. д.)

Молекулярно-лучевая эпитаксия твердого раствора GaP_xAs_{1-x} на вицинальной поверхности (001): кинетическая модель формирования состава в анионной подрешетке. <i>Путьято М. А., Емельянов Е. А., Петрушков М. О., Васев А. В., Семягин Б. Р., Преображенский В. В.</i>	1	51
Исследование анизотропии формы нанокристаллов методом EXAFS-спектроскопии. <i>Свит К. А., Журавлев К. С.</i>	1	65
К теории гомогенного зарождения некогерентных включений в твердых растворах. <i>Вещунов М. С.</i>	2	214
Характеристики дефектов и энтропия смешения в высокоэнтропийных сплавах системы FeNiCrCoCu. <i>Кончаков Р. А., Макаров А. С., Кобелев Н. П., Хоник В. А.</i>	3	367
Моделирование процессов формирования структуры биметаллических нанокластеров Ag–Au. <i>Гафнер С. Л., Гафнер Ю. Я., Редель Л. В., Головенько Ж. В.</i>	4	516

4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах

4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы

- Нуклеация в неидеальном быстро охлаждающемся паре. *Перевошиков Е. Е., Жуховицкий Д. И.* 1 73
- Распределение фаз в одномерной локализации и фазовые переходы в одномерных волноводах. *Суслов И. М.* 2 233
- О решении электростатических задач методом собственных функций. *Балагуров Б. Я.* 4 558
- Механизмы диффузии железа в α -Ti. *Горев Н. Д., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.* 6 807

4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество

- Динамические и статические свойства негејзенберговского анизотропного антиферромагнетика при ненулевой температуре. *Ярыгина Е. А., Козачек В. В., Матюнина Я. Ю., Космачев О. А., Фридман Ю. А.* 1 98
- Размерные эффекты в магнитосопротивлении нанослоев тантала со спин-орбитальным взаимодействием. *Устинов В. В., Наумова Л. И., Заборницын Р. С., Ясюлович И. А., Максимова И. К., Криницина Т. П., Павлова А. Ю., Проглядо В. В., Милляев М. А.* 1 114
- Магнитоэлектрическое возбуждение резонансных переходов в электронной спиновой системе примесных ионов ^{167}Er в ортосиликате иттрия (Y_2SiO_5). *Тарасов В. Ф., Соловаров Н. К., Суханов А. А., Заварцев Ю. Д.* 2 250
- Коллапс малой петли магнитного гистерезиса гранулярного высокотемпературного сверхпроводника $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. *Балаев Д. А., Семёнов С. В., Гохфельд Д. М., Петров М. И.* 2 258
- Ферромагнитный порядок в вандерваальсовом соединении Fe_3GeTe_2 . *Меньшин В. В.* 3 389

- Спин-флоп-переход, индуцирующий магнитострикционные и магнитоэлектрические аномалии в монокристалле α -MnS. *Абрамова Г. М., Фрейдман А. Л., Скоробогатов С. А., Воротынов А. М., Жарков С. М., Молокеев М. С., Панкрац А. И.* 3 396
- Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с фрустрациями на решетке кагоме. *Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А., Ризванова Т. Р.* 3 404
- Влияние легирования кремнием на термодинамические, магнитные и упругие свойства ОЦК-сплавов Fe-Cr. *Пономарева А. В.* 3 410
- Ferromagnetic response of thin NiI_2 flakes up to room temperatures. *Orlova N. N., Avakyants A. A., Timonina A. V., Kolesnikov N. N., Deviatov E. V.* 4 536
- Исследование взаимосвязи топологического фазового перехода, аксионо-подобного состояния и магнитоэлектрического эффекта в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi_2Te_4 . *Шикин А. М., Естюнина Т. П., Ерыженков А. В., Зайцев Н. Л., Тарасов А. В.* 4 544
- Вариации обменного смещения и магнитная анизотропия пленочных структур на основе антиферромагнетика FeMn. *Васюковский В. О., Быкова А. А., Горьковенко А. Н., Москалев М. Е., Лепаловский В. Н.* 5 665
- Влияние однородного электрического поля на вихреподобные магнитные структуры в перфорированных пленках. *Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М.* 5 673
- Управление температурой спин-переориентационного перехода в монокристаллах ортоферритов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. *Шайхутдинов К. А., Скоробогатов С. А., Князев Ю. В., Камжова Т. Н., Васильев А. Д., Семенов С. В., Павловский М. С., Красиков А. А.* 5 685
- Особенности анизотропии узких полосок из тонких магнитных пленок, осажденных в постоянном магнитном поле. *Беляев Б. А., Боев Н. М., Скоморухов Г. В., Соловьев П. Н., Лукьяненко А. В., Горчаковский А. А., Подшивалов И. В., Изотов А. В.* 5 700

4.3 Сверхпроводимость и сверхтекучесть

- Влияние облучения ионами Хе с энергией 167 МэВ на сверхпроводящие свойства ВТСП-лент второго поколения. *Дегтяренко П. Н., Скуратов В. А., Васильев А. Л., Овчаров А. В., Петржик А. М., Семина В. К., Гаврилкин С. Ю., Новиков М. С., Малявина А. Ю., Амеличев В. А., Цветков А. Ю.* 6 827

4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов

- Нуклеация в неидеальном быстро охлаждающемся паре. *Первощиков Е. Е., Жуховицкий Д. И.* 1 73
- О решении электростатических задач методом собственных функций. *Балагуров Б. Я.* 4 558

5. Электронные свойства твердых тел

5.1 Электронные свойства металлов и диэлектриков

- Влияние легирования кремнием на термодинамические, магнитные и упругие свойства ОЦК-сплавов Fe–Cr. *Пономарева А. В.* 3 410
- Сильно нелинейный эффект Холла в макроскопически неоднородной двумерной системе. *Шуплецов А. В., Нунупаров М. С., Приходько К. Е., Кунцевич А. Ю.* 4 572
- Нелинейные колебания слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле в рамках маломодового приближения. *Некрасов О. О., Картавых Н. Н.* ... 6 848

5.2 Сильно коррелированные электронные системы

- Ferromagnetic response of thin NiI₂ flakes up to room temperatures. *Orlova N. N., Avakyants A. A., Timonina A. V., Kolesnikov N. N., Deviatov E. V.* 4 536

- Исследование взаимосвязи топологического фазового перехода, аксионо-подобного состояния и магнитоэлектрического эффекта в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi₂Te₄. *Шижин А. М., Естюнина Т. П., Ерыженков А. В., Зайцев Н. Л., Тарасов А. В.* 4 544
- Влияние однородного электрического поля на вихреподобные магнитные структуры в перфорированных пленках. *Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М.* 5 673

5.3 Физика полупроводников

- Особенности поляризованной люминесценции неоднородного ансамбля локализованных экситонов. *Котова Л. В., Кочерешко В. П.* 6 818
- Захват электронов и дырок на состояния вакансий ртути с испусканием одиночного оптического фотона при рекомбинации Шокли–Рида–Холла в узкозонных твердых растворах HgCdTe. *Козлов Д. В., Румянцев В. В., Янцер А. А., Морозов С. В., Гавриленко В. И.* 6 840

5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)

- Распределение фаз в одномерной локализации и фазовые переходы в одномодовых волноводах. *Суслов И. М.* 2 233
- Сильное отрицательное магнитосопротивление и прыжковый транспорт в графенизированных нематических аэрогелях. *Цебро В. И., Николаев Е. Г., Кутузов М. С., Садаков А. В., Соболевский О. А.* 2 266
- Изменение свойств пленок дихалькогенидов переходных металлов на различных стадиях их формирования в процессе химического газофазного осаждения. *Логинов А. Б., Исмагилов Р. Р., Федотов П. В., Сапков И. В., Куватов М. М., Логинов Б. А., Образцова Е. Д., Образцов А. Н.* 3 355
- Различные режимы электронного транспорта в допированных нанопроволоках InAs. *Жуков А. А., Батов И. Е.* 3 424
- Моделирование процессов формирования структуры биметаллических нанокластеров Ag–Au. *Гафнер С. Л., Гафнер Ю. Я., Редель Л. В., Головенько Ж. В.* 4 516

Сильно нелинейный эффект Холла в макроскопически неоднородной двумерной системе. <i>Шуплецов А. В., Нунупаров М. С., Приходько К. Е., Кунцевич А. Ю.</i>	4	572
Влияние внешнего давления на поведение металлической фазы органического квазидвумерного проводника κ -(BEDT-TTF) ₂ Hg(SCN) ₂ Cl. Вклад корреляционных эффектов. <i>Песоцкий С. И., Любовский Р. Б., Зверев В. Н., Григорьев П. Д., Могилюк Т. И., Торуюнова С. А., Жилляева Е. И.</i>	5	710
Quantum transport through the graphene-silicene nanoribbons junction. <i>Najarsadeghi M., Fouladi A. A., Rostami A. Z., Pahlavan A.</i>	6	833

6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи

6.1 Статистическая физика

Два этапа формирования структуры ветвления листового дерева. <i>Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Яшина Е. Г.</i>	3	438
Нелинейные колебания слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле в рамках маломодового приближения. <i>Некрасов О. О., Картавых Н. Н.</i> ..	6	848

6.2 Полимеры, жидкие кристаллы

Поведение смесей активных и пассивных нематиков в ограниченной двумерной круглой области. <i>Миранцев Л. В.</i>	5	718
---	---	-----

6.3 Физика биологических систем

Два этапа формирования структуры ветвления листового дерева. <i>Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Яшина Е. Г.</i>	3	438
Диффузное рентгеновское рассеяние на пленке 1-додеканола на границе н-гексана-вода. <i>Тихонов А. М., Волков Ю. О.</i>	4	486
Поведение смесей активных и пассивных нематиков в ограниченной двумерной круглой области. <i>Миранцев Л. В.</i>	5	718

6.5 Динамика жидкостей

Корреляции флуктуаций течения, возбуждаемых случайной силой на фоне сдвигового потока. <i>Колоколов И. В., Лебедев В. В.</i>	1	128
Термодинамический критерий нейтральной устойчивости ударных волн в гидродинамике и его следствия. <i>Конюхов А. В.</i> ..	4	589
Поведение смесей активных и пассивных нематиков в ограниченной двумерной круглой области. <i>Миранцев Л. В.</i>	5	718
Нелинейные колебания слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле в рамках маломодового приближения. <i>Некрасов О. О., Картавых Н. Н.</i> ..	6	848

6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез

Генерация плоской стационарной ударной волны при предельно высокой передаче давления твердому веществу от малоплотного поглотителя излучения тераваттного лазерного импульса. <i>Белов И. А., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Вергунова Г. А., Воронин А. Ю., Гаранин С. Г., Головкин С. Ю., Гуськов С. Ю., Демченко Н. Н., Деркач В. Н., Змитренко Н. В., Илюшечкина А. В., Кравченко А. Г., Кузина А. А., Кузьмин И. В., Кучугов П. А., Мюсова А. Е., Рогачев В. Г., Рукавишников А. Н., Соломатина Е. Ю., Стародубцев К. В., Стародубцев П. В., Чуэров И. А., Шаров О. О., Яхин Р. А.</i> ...	4	581
Электродинамика плазменного соленоида и электромагнитные свойства индуктивного разряда. <i>Карташов И. Н., Кузелев М. В.</i> ..	5	725
О воздействии потока ионов гелиевой плазмы повышенной энергии на наноструктуру вольфрама. <i>Кулагин В. В., Цвентух М. М.</i>	5	742
Диэлектрические и плазменно-диэлектрические черенковские усилители субтерагерцового диапазона на релятивистских электронных пучках большой плотности. <i>Ершов А. В., Карташов И. Н., Кузелев М. В.</i>	6	857

Модель солитонной турбулентности высокочастотных флуктуаций частично замагниченной плазмы. <i>Ковалева И. Х., Ковалев А. Т.</i>	6	870
Изучение плотной плазмы свинца. <i>Анфельбаум Е. М., Кондратьев А. М., Рахель А. Д.</i>	6	876

6.7 Вычислительная физика, сложные системы

Локальная структура и затвердевание стеклообразующего расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ под высоким давлением: эксперимент, моделирование, машинное обучение. <i>Меньшикова С. Г., Щелкачев Н. М.</i>	5	655
---	---	-----

6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем

Экранированное и ван-дер-Ваальсовское взаимодействие в пылевой плазме и электролитах. <i>Филиппов А. В.</i>	2	276
Неустойчивость Кельвина–Гельмгольца в нелинейной оптике. <i>Рубан В. П.</i>	2	294
Поляризационные характеристики спектра электродинамического эффекта Штарка. <i>Демура А. В., Леонтьев Д. С., Лисица В. С.</i>	3	341
Термодинамический критерий нейтральной устойчивости ударных волн в гидродинамике и его следствия. <i>Конюхов А. В.</i> ..	4	589
Модель солитонной турбулентности высокочастотных флуктуаций частично замагниченной плазмы. <i>Ковалева И. Х., Ковалев А. Т.</i>	6	870

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 на русском и на английском языках.

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

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. 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.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ras.ru);

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате L^AT_EX или Word, рисунки — в формате EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом.

5. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука,

Москва (1984), с. 1.

2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).

3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).

4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.

5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.

6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № P-16-22 (1987).

8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).

9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.

6. Все рисунки должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте.

7. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.pdf-файла. Список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.

9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер контактного телефона.

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

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