

ISSN 0044-4510

Том 166, Выпуск 2

Август 2024

**Ж**УРНАЛ  
**Э**КСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ  
*и*  
**Т**ЕОРЕТИЧЕСКОЙ  
**Ф**ИЗИКИ



Специальный выпуск, посвященный 130-летию П.Л. Капицы  
Выпускающие редакторы:  
А.И. Смирнов, С.С. Сосин



НАУКА  
— 1727 —



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
**ЖУРНАЛ**  
**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**  
**И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 166, ВЫПУСК 2 (8)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

АВГУСТ 2024

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

**СОДЕРЖАНИЕ**

**АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА**

- Самосогласованный квазиклассический подход к описанию движения частицы в диссипативной среде ..... Сазонов С. В. 153
- Когерентное управление населенностями связанных состояний в квантовых ямах парой полупериодных аттосекундных импульсов ..... Архипов Р. М., Дьячкова О. О., Белов П. А., Архипов М. В., Пахомов А. В., Розанов Н. Н. 162
- Когерентное распространение полуциклового светового импульса в трехуровневой среде ..... Архипов Р. М., Пахомов А. В., Архипов М. В., Розанов Н. Н. 174
- Vacuum birefringence and dichroism in a strong plane-wave background ..... Aleksandrov I. A., Shabaev V. M. 182
- Моделирование процессов поглощения энергии в воде вблизи поверхности золотой наночастицы при облучении фотонами рентгеновского диапазона ..... Чайников А. П., Кочур А. Г., Дуденко А. И. 194
- Процесс расщепления фотона в сильном магнитном поле с учетом влияния позитрония ..... Румянцев Д. А., Шленев Д. М., Чистяков М. В. 209

**ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА**

- Effect of color randomization on  $p_T$  broadening of fast partons in turbulent quark-gluon plasma ..... Zakharov V. G. 216

**ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ**

- Атомный механизм влияния упругих деформаций эпитаксиальных слоев Ge на поверхности Si(111) на диффузию адатомов Ge ..... Жачук Р. А. 232

© Российская академия наук, 2024

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2024

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

Влияние амплитуды магнитного поля на кинетику перемагничивания магнитных наночастиц .....	238
.....Зубарев А. Ю., Исакова Л. Ю., Мусихин А. Ю.	
Магнитные и сверхпроводящие свойства допированных Fe высокотемпературных сверхпроводников YBaCuO, синтезированных золь-гель-методом .....	246
.....Пигальский К. С., Вишнёв А. А., Ефимов Н. Н., Васильев П. Н., Шабатин А. В., Трахтенберг Л. И.	

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Fabrication and study of the $p - Si/\alpha - Si/Ag$ memristor crossbar array .....	255
.....Samsonova A., Yegiyan S., Klimenko O., Antonov V. N., Paradezhenko G., Prodan D., Pervishko A., Yudin D., Brilliantov N.	
Untangling the valley structure of states for intravalley exchange anisotropy in lead chalcogenides quantum dots .....	261
.....Avdeev I. D., Nestoklon M. O.	

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

BKT transition in Phyllotaxis .....	277
.....Nechaev S. K.	

# САМОСОГЛАСОВАННЫЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В ДИССИПАТИВНОЙ СРЕДЕ

*С. В. Сазонов\**

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

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

Поступила в редакцию 21 января 2024 г.,  
после переработки 17 марта 2024 г.  
Принята к публикации 18 марта 2024 г.

Предложен приближенный самосогласованный подход, позволяющий описывать квазиклассическую поступательную динамику нерелятивистской частицы в диссипативной среде при произвольном характере зависимости соответствующих диссипативных сил от скорости. Показано, что диссипация подавляет квантовые свойства частицы. Это приводит к необходимости интерпретировать распространение в диссипативной среде как непрерывный процесс измерения состояния частицы. В качестве примеров рассмотрены нестационарные когерентные состояния частицы на трех стадиях ее торможения в среде за счет ионизационных потерь. Данные стадии соответствуют высокоэнергетическим потерям, потерям в окрестности брэгговского пика, а также низкоэнергетическим потерям на заключительной стадии распространения.

DOI: 10.31857/S0044451024080017

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов квантования в открытых системах тесно связано с фундаментальными вопросами измерения состояний квантовых объектов [1, 2]. В качестве квантового объекта может выступать частица, над которой производит измерение диссипативная среда, выполняющая роль классического прибора. При этом непрерывное измерение средой состояния частицы сопровождается непрерывным коллапсом волновой функции [3].

На сегодняшний день существует множество способов квантово-механического описания движения частиц в диссипативных средах [4–17]. При этом следует заметить, что различные методы зачастую приводят к несколько различающимся физическим результатам и выводам. С физической точки зрения, весьма последовательным и приводящим к разумным результатам представляется подход, основанный на марковском приближении при решении

уравнений для матрицы плотности [18–23]. С другой стороны, гамильтонов подход, предложенный в работах [4, 5], привлекает своей простотой. Однако здесь возникают трудности при квантовом рассмотрении движения частиц в объемных средах [24, 25].

Гамильтонов способ квантования можно использовать после классического анализа движения выделенной частицы в среде, которая действует на эту частицу посредством диссипативных сил. Таким образом, в этом случае можно говорить о поиске квантового соответствия движению классической частицы. Уже на данном этапе рассуждений становится понятной квазиклассическая суть подобного рассмотрения.

В работах [4–7] развит способ квантования в случае, когда на нерелятивистскую частицу действует диссипативная сила, пропорциональная скорости  $\mathbf{v}$ . В работах [26, 27] предложена процедура квазиклассического квантования при наличии диссипативных сил, пропорциональных скорости и квадрату скорости частицы. Важно заметить, что данные силы вводятся в теорию феноменологически, без детального анализа их физической природы. Последовательное микроскопическое рассмотрение движения час-

\* E-mail: sazonov.sergey@gmail.com

тиц в различных средах показывает, что сопровождающим данное движение потерям энергии можно сопоставить силы, зависящие от скорости весьма сложным образом [28–30]. В этой связи возникает задача разработки подхода, который позволит найти квазиклассическое соответствие движению нерелятивистской классической частицы под действием диссипативных сил, произвольно зависящих от скорости. Решению этой задачи посвящена настоящая работа.

## 2. КЛАССИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ

Пусть движение классической частицы массы  $m$  описывается лагранжианом  $L$ , явная зависимость которого от времени определяется функцией  $q(t)$ :

$$L = \frac{m\mathbf{v}^2}{2}q(t). \quad (1)$$

Будем полагать ниже, что какие-либо внешние консервативные силы отсутствуют.

Отсюда с помощью уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

придем к уравнению движения

$$m\dot{\mathbf{v}} = -m \frac{\dot{q}}{q} \mathbf{v}, \quad (2)$$

где точка над переменной обозначает производную по времени.

Пусть диссипативная сила, действующая на частицу, имеет вид

$$\mathbf{F}_d = -mf(v(t))\mathbf{v}, \quad (3)$$

где  $f(v(t))$  — некоторая положительно определенная функция, зависящая от времени через скорость  $v$  частицы.

Сопоставляя (2) с классическим уравнением движения и учитывая (3), имеем

$$\frac{\dot{q}}{q} = f(v(t)). \quad (4)$$

Интегрируя (2), получим

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{v}_0}{q}, \quad (5)$$

где  $\mathbf{v}_0$  — начальная (при  $t = 0$ ) скорость частицы.

Интегрируя (5), найдем классическую траекторию частицы, описываемую зависимостью радиус-вектора  $\mathbf{r}_c$  частицы от времени:

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0\tau, \quad (6)$$

где  $\mathbf{r}_0$  — начальный радиус-вектор частицы, а реду-

цированное время  $\tau$  определяется выражением

$$\tau = \int_0^t \frac{dt'}{q(t')}. \quad (7)$$

Отсчет времени здесь начинается с момента попадания частицы в диссипативную среду.

Подставляя (5) в (4), придем к дифференциальному уравнению для определения функции  $q$ :

$$\dot{q} = qf(v_0/q). \quad (8)$$

Дополним данное уравнение очевидным (см. (5)) начальным условием

$$q(0) = 1. \quad (9)$$

Отсюда, а также из (4) следует, что  $q(t)$  — монотонно возрастающая функция времени. Благодаря диссипации, частица в конце-концов останавливается. Тогда, учитывая (5) и (9), приходим к выводу, что значения  $q(t)$  лежат в интервале  $1 \leq q(t) \leq \infty$ . Отсюда и из (7) видно, что  $\tau(t)$  также монотонно возрастает с течением времени. Если  $q(t)$  достигает бесконечного значения за конечное время  $t_{max}$ , то верхнему пределу в интеграле (7),  $t = t_{max}$ , соответствует максимальное значение редуцированного времени  $\tau_{max}$ . Возможны ситуации, когда  $t_{max} \rightarrow \infty$  (см. ниже). В общем случае интеграл (7) при  $t = t_{max}$  может быть как сходящимся, так и расходящимся.

Таким образом, решив задачу (8), (9), найдем функцию  $q(t)$ . Этим самым будет найден лагранжиан (1), самосогласованным образом учитывающий действие на частицу диссипативной силы (3). В свою очередь, с помощью (5) мы определим классическую скорость частицы как функцию времени. Затем, подставив  $q(t)$  в (7), найдем редуцированное время  $\tau$ . После этого выражение (6) позволит нам определить положение классической частицы в пространстве в каждый момент времени.

С прикладной точки зрения, значительный интерес представляет вычисление потерь энергии  $W$  частицы в зависимости от пройденного пути  $s$ . Из (5) и (6) видно, что движение классической частицы является прямолинейным, а ее пройденный путь  $s$  определяется выражением

$$s = |\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_0| = v_0\tau.$$

Тогда, переходя от векторного вида к скалярному, запишем

$$\dot{s} = v \frac{dv}{ds}.$$

В результате уравнение (2) с учетом (4) примет вид

$$\frac{dv}{ds} = -f(v). \quad (10)$$

Интегрируя данное уравнение с учетом граничного условия  $v(0) = v_0$ , найдем зависимость  $v(s)$ . Отсюда получим зависимость энергии  $W = mv^2/2$  частицы от пройденного пути. После этого определим удельные потери  $-dW/ds$ .

Очевидно, что полная длина пробега  $s_{max}$  частицы при торможении в диссипативной среде определится выражением  $s_{max} = v_0\tau_{max}$ .

Используя (1), для канонического импульса найдем

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v}q. \quad (11)$$

Тогда для гамильтониана

$$H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L$$

будем иметь

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2mq(t)}. \quad (12)$$

Выражения (2), (4)–(9) описывают классическую траекторию частицы, соответствующую экстремуму функционала действия

$$S = \int_0^t L dt'.$$

Поэтому решение уравнения (8) при начальном условии (9) содержит величину  $v_0$  начальной скорости частицы. В результате подстановка найденной функции  $q(t)$  при заданном значении  $v_0$  в выражение (12) приводит к эффективному гамильтониану, в котором самосогласованным образом учитывается действие на классическую частицу диссипативных сил, произвольным образом зависящих от скорости частицы. Поскольку характер явной зависимости  $q(t)$  определяется только классической траекторией частицы, последующее квантование движения на основе выражений (3), (8), (9) и (12) содержит в себе признаки квазиклассического приближения [31].

Эффективный гамильтониан (12) зависит от начальной скорости  $v_0$ . Поэтому рассматриваемое условие самосогласования заранее накладывает ограничение на вид волновой функции частицы. А именно, данный вид должен содержать в себе признаки классической частицы, обладающей заданной начальной скоростью.

### 3. КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА

Для перехода к квантово-механическому описанию совершим стандартную замену канонического импульса  $\mathbf{p}$  эрмитовым оператором  $\hat{\mathbf{p}}$  в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla.$$

Тогда нестационарное квазиклассическое уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  запишется в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mq(t)}\nabla^2\psi, \quad (13)$$

где  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор, принадлежащий одной из виртуальных траекторий частицы.

Легко видеть, что из (13) следует уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0,$$

где

$$\rho = |\psi|^2,$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2imq}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).$$

Отсюда видно, что величина  $\rho(\mathbf{r}, t)$ , как и в консервативном случае, имеет смысл плотности вероятности обнаружения частицы в точке с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$ . Следовательно, здесь также справедливо условие нормировки

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1,$$

где интегрирование ведется по всему пространству, в котором может находиться частица.

При начальной волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, 0)$  уравнение (13) имеет следующее решение:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}', 0) d\mathbf{r}', \quad (14)$$

где квазиклассическая функция Грина  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t)$  определяется выражением

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\tau}\right)^{3/2} \exp\left(i\frac{m}{2\hbar\tau}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2\right). \quad (15)$$

Динамический параметр  $q(t)$  в квазиклассическом уравнении Шредингера (13) зависит от величины  $v_0$  начальной скорости частицы (см. (8)). Поэтому в соответствии с самосогласованным подходом выберем начальную волновую функцию в виде гауссова волнового пакета, центрированного в начальной точке  $\mathbf{r}_0$  нахождения классической частицы и содержащего ее начальную скорость  $\mathbf{v}_0$  [32, 33]:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4}l^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}{4l^2} + i\frac{m}{\hbar}\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{r}\right), \quad (16)$$

где  $l$  — начальный пространственный масштаб локализации плотности вероятности, имеющий смысл начальной неопределенности декартовых координат частицы [32, 33].

Подставляя (15) и (16) в (14), получим

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4}} \left( \frac{l}{l^2 + i\hbar\tau/2m} \right)^{3/2} \times \exp \left[ -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c|^2}{4(l^2 + i\hbar\tau/2m)} + i\frac{m}{\hbar} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{r} - i\frac{mv_0^2}{2\hbar} \tau \right], \quad (17)$$

где  $\mathbf{r}_c$  и  $\tau$  определяются соответственно выражениями (6) и (7).

В консервативной среде (при отсутствии диссипации)  $q = 1$  во все моменты времени  $t = 0$ . Тогда из (7) следует, что  $\tau = t$ . В этом случае волновая функция (17) соответствует когерентному состоянию свободной частицы [34]. Для конкретных случаев диссипативных сред, когда присутствуют силы сопротивления, пропорциональные скорости и квадрату скорости, аналогичные состояния принадлежат к классу квазиклассических когерентных состояний [26, 27, 35].

Из (16) для плотности вероятности имеем выражение

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} l_\tau^3} \exp \left( -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c|^2}{2l_\tau^2} \right), \quad (18)$$

где пространственный масштаб  $l_\tau$  при прохождении частицей дистанции  $s$  в моменты времени  $t \geq 0$  определяется соотношением

$$l_\tau = \sqrt{l^2 + \left( \frac{\hbar\tau}{2ml} \right)^2} = l \sqrt{1 + \left( \frac{s}{l_D} \right)^2}, \quad (19)$$

где  $l_D = 2l^2/\lambda$  — дифракционная длина, соответствующая начальной волновой функции (16),  $\lambda = \hbar/mv_0$  — начальная дебройлевская длина волны частицы.

Из (19) видно, что волновой пакет плотности вероятности по мере распространения в диссипативной среде испытывает уширение до максимального значения  $l_\tau^{max}$  его размера, определяемого по формуле (19) с учетом замены  $s \rightarrow s_{max} = v_0\tau_{max}$ . Таким образом, остановка локализованного волнового пакета сопровождается «заморозкой» его пространственного размера. На этой стадии в (18) следует совершить замену  $l_\tau \rightarrow l_\tau^{max}$ . При этом радиус-вектор центра статического волнового пакета определяется выражением  $\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0\tau_{max}$ .

При условии сильной диссипации,  $s_{max} \ll l_D$ , частица практически не проявляет волновых свойств. В этом случае, как следует из (19),  $l_\tau^{max} \approx l$ . Поэтому здесь частица ведет себя при поступательном движении как классический объект.

При слабой диссипации,  $s_{max} \gg l_D$ , под знаком корня в формуле (19) с учетом замены  $s \rightarrow s_{max}$  можно учесть только второе слагаемое. Тогда имеем

$$l_\tau^{max} = \frac{\lambda}{2l} s_{max}. \quad (20)$$

В этом случае, описывая поступательное движение частицы, необходимо учитывать ее волновые свойства.

Используя (17) и стандартные правила квантовой механики [32, 33], легко показать, что неопределенности  $\Delta p_j$  декартовых компонент канонического импульса, где  $j = x, y, z$ , не изменяются со временем и определяются соотношениями  $\Delta p_j = \hbar/2l$ . Отсюда и из (11) для неопределенностей  $\Delta p_j^{(ph)}$  декартовых компонент физического импульса  $p_j^{(ph)} = mv_{j0}$  имеем  $\Delta p_j^{(ph)} = \hbar/2ql$ . При этом неопределенности декартовых координат  $\Delta x_j = l_\tau$ . Тогда соотношения неопределенностей типа «координата – канонический импульс» и «координата – физический импульс» имеют соответственно вид

$$\Delta x_j \Delta p_j = \frac{\hbar l_\tau}{2l}, \quad (21)$$

$$\Delta x_j \Delta p_j^{(ph)} = \frac{\hbar l_\tau}{2ql}. \quad (22)$$

Отсюда, а также из (9) и (19) видно, что в начальный момент времени соотношения неопределенностей (21) и (22) минимизируются:

$$\Delta x_j \Delta p_j = \Delta x_j \Delta p_j^{(ph)} = \hbar/2.$$

Это, как было сказано выше, соответствует когерентному состоянию (16) частицы при  $t = 0$ .

Как было отмечено выше,  $\tau = t$  в консервативной среде, а волновая функция (17) при такой замене обладает свойствами когерентного состояния свободной частицы [34]. При этом соотношения неопределенностей (21) и (22) тождественны, так как нет различия между каноническим и физическим импульсами. Тогда, как видно из (19), правые части соотношений неопределенностей (21) и (22) неограниченно растут с течением времени.

Отталкиваясь от сказанного в предыдущем абзаце, назовем состояние с волновой функцией (17) когерентным состоянием частицы в диссипативной среде. В этом случае нарушается знак равенства между каноническим и физическим импульсами. Правая часть соотношения неопределенностей (21) монотонно возрастает с течением времени, достигая максимального значения

$$\Delta x_j \Delta p_j = \hbar l_\tau^{max}/2l.$$

Иначе ведет себя правая часть соотношения неопределенностей (22). Так как с течением времени функция  $q(t)$  возрастает, достигая в момент остановки частицы бесконечности, то правая часть в этот момент обращается в нуль. Это происходит из-за того, что в момент остановки частицы обращаются в нуль неопределенности всех декартовых компонент физического импульса. Данная ситуация соответствует непрерывному коллапсу волновой функции в импульсном пространстве. По этой причине распространение частицы в диссипативной среде следует рассматривать как непрерывный процесс измерения ее состояния. Беспорядочные последовательные столкновения выделенной частицы с большим количеством частиц среды, рассматриваемые в усредненном марковском приближении, приводят к диссипативным потерям и одновременно представляют собой непрерывный измерительный процесс. Диссипативная среда здесь играет роль регистратора (своего рода протяженной фотопластинки) состояния частицы в каждый момент времени. При  $s = s_{max}$  (или  $t = t_{max}$ ) происходит регистрация остановившейся частицы в малой пространственной окрестности конечной точки классической траектории. Характерный радиус  $l_{\tau}^{max}$  этой окрестности фактически ограничивает разброс точек пространства, в которых может быть зарегистрирована частица при конкретном акте измерения.

Учитывая усредненный характер описания динамики торможения частицы посредством регулярно зависящей от скорости диссипативной силы, говорить здесь об остановке частицы можно лишь условно. При малых скоростях частицы все большее влияние на ее движение оказывают нерегулярные (броуновские) столкновения с частицами среды. Соответствующее исследование выходит за рамки настоящей работы.

Так как при  $t = 0$  канонический и физический импульсы равны друг другу (см. (11) и (9)), равенство (20) можно переписать в виде

$$\frac{\Delta x_j^{max}}{s_{max}} = \frac{\Delta p_{j0}}{p_0}. \quad (23)$$

Здесь  $p_0 = mv_0$  – начальный импульс частицы.

Условие применимости квазиклассического приближения в нашем случае имеет вид

$$\frac{\Delta x_j^{max}}{s_{max}} \sim \frac{l_{\tau}^{max}}{s_{max}} \ll 1.$$

Используя здесь (20), получим

$$\lambda / \Delta x_j^{max} \ll 1.$$

Таким образом, начальная длина волны де Бройля должна быть значительно меньше неопределенностей координат частицы. Это утверждение в точности совпадает с выводом, представленным в работе [34]. Из (20) и (23) видно, что данный вывод эквивалентен неравенству

$$\Delta p_{j0} / p_0 = \Delta v_{j0} / v_0 \ll 1,$$

где  $\Delta v_{j0} \sim \hbar / ml$  – неопределенность  $j$ -й декартовой компоненты начальной скорости.

Из (20) видно, что отношение  $\lambda / l$  играет роль угла дифракционной расходимости волнового пакета плотности вероятности. Малое значение данного угла вполне очевидным образом соответствует условию применимости квазиклассического приближения.

#### 4. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СРЕДЕ С ИОНИЗАЦИОННЫМИ ПОТЕРЯМИ

В качестве конкретных примеров рассмотрим три стадии распространения заряженной частицы, сопровождаемого ее ионизационными потерями в некоторой среде.

##### 4.1. Ионизационное торможение в условиях высокоэнергетических потерь

Пусть быстрая, но нерелятивистская заряженная частица влетает в среду, где тормозится за счет потерь энергии на ионизацию данной среды. При этом скорость  $v$  влетающей частицы удовлетворяет условию  $v > \alpha c$ , где  $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$ ,  $e$  – заряд электрона,  $c$  – скорость света в вакууме [36]. В этом случае нерелятивистская версия формулы Бете–Блоха для удельных ионизационных потерь заряженной частицы при ее прохождении через вещество имеет вид [37, 38]

$$-\frac{dW}{ds} = \frac{m\sigma}{v^2}, \quad (24)$$

где

$$\sigma = \frac{4\pi Z_{\alpha}^2 e^4}{m_e m} Z n \ln \frac{2m_e v^2}{I},$$

$Z_{\alpha}$  и  $Z$  – зарядовые числа рассматриваемой частицы и ядер вещества, при взаимодействии с которыми происходит торможение частицы,  $n$  – концентрация ядер вещества,  $I$  – энергия ионизации атомов вещества,  $m_e$  – масса электрона.

Поскольку

$$m\dot{v} = mv \frac{dv}{ds} = \frac{d(mv^2/2)}{ds} = \frac{dW}{ds},$$



правая часть в (24) имеет смысл классической силы, действующей на частицу со стороны среды. Переходя к векторной форме, запишем для данной силы

$$\mathbf{F}_d = -m\sigma\mathbf{v}/v^3.$$

Отношение под знаком логарифма в выражении для  $\sigma$  по порядку величины равно  $(v/\alpha c)^2$ . Пусть характерная скорость частицы  $v \sim 10^9$  см/с  $> \alpha c \sim 0.1c$  [39]. При таких скоростях частицу еще можно считать нерелятивистской. Тогда  $2m_e v^2/I \sim 10^2$ . В этих условиях логарифм в выражении для  $\sigma$  является медленной функцией скорости. Поэтому с неплохим приближением можно положить  $\sigma = \text{const}$ . В этом случае

$$f(q/v_0) = \sigma/v^3 = \sigma q^3/v_0^3.$$

После интегрирования (8) с учетом (9) имеем

$$q = (1 - t/t_{max})^{-1/3}, \quad (25)$$

где

$$t_{max} = \frac{v_0^3}{3\sigma}. \quad (26)$$

Отсюда, а также из (7) и (6) найдем

$$\tau = \frac{3}{4}t_{max} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{t}{t_{max}} \right)^{4/3} \right], \quad (27)$$

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + \frac{3}{4}\mathbf{v}_0 t_{max} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{t}{t_{max}} \right)^{4/3} \right]. \quad (28)$$

Полагая в (27)  $t = t_{max}$ , получим

$$\tau_{max} = \frac{3t_{max}}{4} = \frac{v_0^3}{4\sigma}.$$

Тогда длина полного пробега

$$s_{max} = \frac{v_0^4}{4\sigma}. \quad (29)$$

Из (29) и (19) найдем максимальный размер локализованного волнового пакета в момент его остановки при  $t = t_{max}$ .

Подставляя в (10)  $f(v) = \sigma/v^3$ , после интегрирования получим

$$v^2 = v_0^2 \sqrt{1 - s/s_{max}}.$$

После подстановки данного выражения в (24) для удельных ионизационных потерь найдем

$$-\frac{dW}{ds} = \frac{W_0}{s_{max} \sqrt{1 - s/s_{max}}}, \quad (30)$$

где  $W_0 = mv_0^2/2$  — начальная энергия частицы.

Таким образом, в точке остановки частицы ее удельные потери неограниченно возрастают, а размер волнового пакета плотности вероятности достигает своего максимального значения.

Неограниченный рост удельных потерь обусловлен здесь тем, что при  $v \rightarrow 0$  формула (22), где  $\sigma = \text{const}$ , перестает быть справедливой. Более того, в этом случае уже несправедливы многие предположения, при которых была получена формула Бете–Блоха [29, 39].

В реальных условиях быстрый рост удельных ионизационных потерь на промежуточной части пробега частицы ограничивается известным пиком Брэгга, после чего удельные потери быстро спадают до нулевых значений [29, 39]. В окрестности брэгговского пика скорость частицы  $v \sim \alpha c$ . Данная окрестность соответствует второй (промежуточной) стадии ионизационного торможения, которую мы рассмотрим ниже.

#### 4.2. Ионизационные потери в окрестности брэгговского пика. «Сухое трение»

В окрестности максимума удельных ионизационных потерь величину  $dW/ds$  можно приближенно считать постоянной. В результате для этой стадии запишем

$$-dW/ds = 2ma, \quad (31)$$

где  $a$  — некоторая положительная постоянная.

Поскольку диссипативная сила всегда направлена против вектора скорости, имеем

$$\mathbf{F}_d = -m\mathbf{a},$$

где

$$\mathbf{a} = a\mathbf{v}/v = a\mathbf{v}_0/v_0.$$

Таким образом, при условии (31) диссипативная сила не зависит от скорости, что в классической механике соответствует «сухому трению». В этом случае

$$f(v) = a/v = aq/v_0.$$

Тогда, интегрируя (8) с учетом (9), найдем

$$q = (1 - at/v_0)^{-1}. \quad (32)$$

Подставляя данное выражение в (7), получим

$$\tau = t - \frac{a}{2v_0}t^2. \quad (33)$$

Отсюда и из (6) имеем хорошо известное выражение для радиус-вектора классической траектории при равнозамедленном движении:

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t - \mathbf{a}t^2/2. \quad (34)$$

Таким образом, в окрестности брэгговского пика волновой пакет плотности вероятности совершает равнозамедленное движение с ускорением  $-a$  (см. (18) и (34)).

Из (5) следует, что частица, а вместе с ней и волновой пакет плотности вероятности (см. (17)), прекращает свое движение при  $q \rightarrow \infty$ . Тогда из (32) приходим к выражению для времени движения частицы  $t_{max} = v_0/a$ . Отсюда и из (33) находим  $\tau_{max} = v_0/2a$ . Таким образом, пройдя за время  $t = t_{max} = v_0/a$  до полной остановки расстояние  $s_{max} = v_0^2/2a$ , волновой пакет плотности вероятности приобретает максимальный статический размер, определяемый по формуле (19) при замене  $s \rightarrow s_{max}$ .

Рассмотренная стадия «сухого трения» является самой короткой из трех стадий ионизационного торможения, так как ей соответствует малая окрестность вблизи максимального значения удельных потерь.

В реальных условиях, прежде чем остановиться, частица переходит в третью (низкоэнергетическую) стадию ионизационного торможения, где  $v \ll ac$  [36]. Ниже проанализируем квазиклассическую динамику частицы на данной стадии.

### 4.3. Ионизационное торможение в условиях низкоэнергетических потерь. «Вязкое трение»

В этом случае для удельных потерь имеем выражение [36, 40–42]

$$-dW/ds = 2m\gamma v, \quad (35)$$

где  $\gamma$  — положительная постоянная.

Из (35) приходим к выводу, что в данном случае соответствующая классическая диссипативная сила (сила «вязкого трения») пропорциональна скорости:  $\mathbf{F}_d = -m\gamma\mathbf{v}$ . Отсюда и из (3) имеем  $f(v) = \gamma$ . Тогда из (8) и (9) находим  $q = e^{\gamma t}$ . Заметим, что данная зависимость  $q(t)$  в точности совпадает с аналогичной зависимостью, найденной в работах [4, 5] без использования квазиклассического приближения. Подставляя данное выражение в (7), найдем

$$\tau = \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma}. \quad (36)$$

Отсюда и из (6) получим

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma}. \quad (37)$$

Подставляя (36) в (19), придем к выражению для пространственного масштаба волнового пакета

плотности вероятности (неопределенности координат частицы) в любой момент времени. Максимальное значение  $l_{\tau}^{max}$  данного масштаба определяется по формуле (19) с учетом замены

$$s \rightarrow s_{max} = v_0\tau_{max} = v_0/\gamma$$

и достигается при  $t \rightarrow \infty$ , когда частица в среде выполняет полный пробег. При этом волновой пакет плотности вероятности останавливается, имея форму трехмерного локализованного статического домена.

После подстановки  $f(v) = \gamma$  в (10), последующего интегрирования и простых преобразований будем иметь для величины удельных потерь

$$-dW/ds = 2m\gamma v_0 (1 - s/s_{max}). \quad (38)$$

Таким образом, удельные потери уменьшаются с увеличением пройденной дистанции и исчезают при  $s = s_{max}$ .

Всем трем рассмотренным стадиям распространения частицы в среде с ионизационными потерями соответствуют классические силы сопротивления, общее выражение для которых имеет вид (3). На начальной, высокоэнергетической, стадии торможения частицы сила сопротивления обратно пропорциональна квадрату скорости. В окрестности брэгговского пика сила сопротивления практически не зависит от величины скорости, поэтому по аналогии с классической механикой здесь мы ее назвали силой «сухого трения». Заключительный, низкоэнергетический, этап торможения описывается диссипативной силой, пропорциональной скорости частицы, что соответствует силе «вязкого трения» в классической механике. Понятно, что во всех случаях речь не идет о силах трения в физическом смысле, так как само это понятие относится к физике макроскопических объектов. Правильнее здесь говорить о соответствующей математической аппроксимации.

Для полного квазиклассического описания торможения частицы на всей дистанции распространения, видимо, следует надлежащим образом произвести «сшивку» всех трех стадий, что не являлось целью настоящей работы.

Приведем некоторые численные оценки для основной стадии высокоэнергетических ионизационных потерь. Длина пробега  $s_{max}$  альфа-частицы в воздухе при нормальных условиях и начальной энергии  $W_0 \sim 10$  МэВ составляет около 10 см [39]. Приведенному значению энергии, как отмечалось выше, соответствует начальная скорость  $v_0 \sim 10^9$  см/с. Тогда начальная длина волны

де Бройля для альфа-частицы  $\lambda \sim 10^{-13}$  см. Пусть начальная неопределенность координаты альфа-частицы составляет порядка атомного размера, т. е.  $l \sim 10^{-8}$  см. Тогда дифракционная длина  $l_D = 2l^2/\lambda \sim 10^{-3}$  см  $\ll s_{max}$ . Следовательно, в этом случае отчетливо проявляются волновые свойства частицы. Подставляя приведенные в данном абзаце значения параметров в формулу (20), будем иметь для неопределенности координаты альфа-частицы после ее остановки  $\Delta x_j^{max} \sim l_r^{max} \sim 10^{-4}$  см. Итак, после пробега в воздухе при условиях ионизационного торможения неопределенность координаты альфа-частицы способна увеличиться на четыре порядка. Для времени, за которое совершается пробег, находим  $t_{max} \sim s_{max}/v_0 \sim 10^{-8}$  с. Полезно также оценить значение параметра  $\sigma$ . Из формулы (29) имеем  $\sigma \sim v_0^4/s_{max} \sim 10^{35}$  см<sup>3</sup>/с<sup>4</sup>. Любопытно заметить, что примерно такое же значение по порядку величины вытекает из формулы, которая записана здесь сразу после (24). Значение параметра  $\sigma$  может позволить вычислять неопределенности координат, пробег и время пробега при всех других начальных энергиях альфа-частицы.

В алюминии длина пробега альфа-частицы при начальной энергии порядка 10 МэВ составляет порядка  $10^{-3}$  см [39]. Легко видеть, что в этом случае дифракционная длина  $l_D \sim s_{max}$ . Поэтому здесь диссипация эффективнее, чем в воздухе, подавляет волновые свойства альфа-частицы.

Для неопределенности  $\Delta v_{j0}$  компонент начальной скорости в обоих рассмотренных выше примерах имеем  $\Delta v_{j0} \sim \hbar/ml \sim 10^4$  см/с. Таким образом, условие применимости квазиклассического приближения  $v_0 \gg \Delta v_{j0}$  выполняется здесь с хорошим запасом.

## 5. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Предложенный в настоящей работе приближенный самосогласованный подход позволяет описывать поступательную динамику квантовой нерелятивистской частицы при действии на нее диссипативной силы, произвольным образом зависящей от величины скорости. В этом смысле данный подход можно рассматривать как обобщение канонического метода, предложенного Калдиолой и Канаи [4, 5], где рассмотрена диссипативная сила, пропорциональная скорости частицы. С другой стороны, самосогласованное приближение, использующее понятие классической траектории, приводит к квазиклассическому, а не к сугубо квантовому рассмотрению.

В предложенном подходе гамильтониан (12) зависит от динамического параметра  $q(t)$ . Характер

явной зависимости данного параметра от времени определяется классической траекторией частицы, определяемой, в том числе, ее начальной скоростью. Поэтому последующее квантование движения приобретает признаки квазиклассического приближения. Как результат, гамильтониан (12) приобретает зависимость от начальной скорости частицы. Затем эта зависимость переносится в уравнение Шредингера (13). В свою очередь, данное обстоятельство накладывает ограничения на круг возможных начальных волновых функций, которые должны соответствовать классическим начальным условиям. В этом состоит недостаток предложенного здесь подхода. С другой стороны, удачный выбор начальной волновой функции частицы способен привести к физически разумным результатам. Здесь в качестве такой функции выбрана хорошо известная функция вида (16), соответствующая когерентному состоянию частицы. В последующие моменты времени волновая функция приобретает вид (17), что соответствует нестационарному квазиклассическому когерентному состоянию.

В дополнение к приведенным выше критериям условие применимости квазиклассического приближения можно наглядным образом выразить в виде неравенства  $l_D \gg \Delta x_{j0}$ . Таким образом, волновые свойства частицы становятся заметными на дистанциях распространения, значительно превышающих начальные неопределенности координат.

Важным результатом является утверждение, что диссипация подавляет квантовые свойства частицы. Поэтому диссипативную среду можно рассматривать как классический прибор, непрерывно измеряющий состояние распространяющейся в данной среде частицы.

В дальнейшем представляет интерес нетривиальное обобщение предложенного здесь подхода на случай, когда помимо внутренних диссипативных сил на частицу действуют внешние силы недиссипативной природы. Это позволит расширить область рассмотрения диссипативных сред как регистраторов частиц в их квазиклассических состояниях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Рубцов, УФН **193**, 783 (2023) [A. N. Rubtsov, Phys. Usp. **66**, 734 (2003)].
2. М. Б. Менский, УФН **173**, 1199 (2003) [M. B. Menskii, Phys. Usp. **46**, 1163 (2003)].

3. Б. Б. Кадомцев, *Динамика и информация*, Редакция журнала «Успехи физических наук», Москва (1999).
4. P. Caldirola, *Nuovo Cimm.* **18**, 393 (1941).
5. E. Kanai, *Progr. Theor. Phys.* **3**, 440 (1948).
6. V. V. Dodonov and V. I. Man'ko, *Phys. Rev. A* **20**, 550 (1979).
7. K. H. Yeon and C. I. Um, *Phys. Rev. A* **36**, 5287 (1987).
8. Б. А. Арбузов, *ТМФ* **106**, 300 (1996) [B. A. Arbuzov, *Theor. Math. Phys.* **106**, 249 (1996)].
9. V. E. Tarasov, *Phys. Lett. A* **288**, 173 (2001).
10. V. E. Tarasov, *Phys. Rev. E* **66**, 056116 (2002).
11. V. G. Kupriyanov, S. L. Lyakhovich, and A. A. Sharapov, *J. Phys. A* **38**, 8039 (2005).
12. D. M. Gitman and V. G. Kupriyanov, *J. Math. Sci.* **141**, 1399 (2007).
13. А. М. Башаров, *Опт. и спектр.* **128**, 186 (2020) [A. M. Basharov, *Opt. Spectr.* **128**, 182 (2020)].
14. А. М. Башаров, *ЖЭТФ* **158**, 978 (2020) [A. M. Basharov, *JETP* **131**, 853 (2020)].
15. S. Madjber, S. Menouar, and J. R. Choi, *Entropy* **23**, 837 (2021).
16. V. E. Tarasov, *Ann. Phys.* **434**, 056116 (2021).
17. M. C. Parker and C. Jaynes, *Entropy* **25**, 629 (2023).
18. V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **17**, 821 (1976).
19. G. Lindblad, *Comm. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
20. H. P. Breuer and F. Petruccione, *Theory of Open Quantum Systems*, Oxford Univ. Press, Oxford (2002).
21. U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific, Singapore (2012).
22. A. Isar, A. Sandulescu, H. Scutaru et al., *Int. J. Mod. Phys. E* **3**, 635 (1994).
23. H. P. Breuer, E. M. Laine, J. Piilo et al., *Rev. Mod. Phys.* **88**, 021002 (2016).
24. V. M. Filippov, V. M. Savchin, and S. G. Shorokhov, *J. Math. Sci.* **68**, 275 (1994).
25. S. T. Ali and M. Engliš, *Rev. Math. Phys.* **17**, 391 (2005).
26. С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 297 (2023) [S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **118**, 302 (2023)].
27. S. V. Sazonov, *Laser Phys. Lett.* **20**, 095203 (2023).
28. Г. Бете, *Квантовая механика*, Мир, Москва (1965) [H. A. Bethe, *Intermediate Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin Inc., New York (1964)].
29. В. В. Балашов, *Строение вещества*, Изд-во МГУ, Москва (1993).
30. И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько, *УФН* **193**, 1249 (2023) [I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, *Phys. Usp.* **66**, 1177 (2023)].
31. Р. Ф. Фейнман, А. Р. Хиббс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968) [R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company, New York (1965)].
32. Л. И. Шифф, *Квантовая механика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1959) [L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Company, New York (1968)].
33. В. В. Балашов, В. К. Долинов, *Курс квантовой механики*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2001).
34. В. Г. Багров, Д. М. Гитман, А. С. Перейра, *УФН* **184**, 961 (2014) [V. G. Bagrov, D. M. Gitman, and A. S. Pereira, *Phys. Usp.* **57**, 891 (2014)].
35. S. V. Sazonov, *Laser Phys. Lett.* **20**, 015202 (2023).
36. Ё. Х. Оцуки, *Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами*, Мир, Москва (1985) [Y. H. Ohtsuki, *Charged Beam Interaction with Solids*, Taylor & Francis Ltd., London (1983)].
37. H. Bethe, *Ann. Phys.* **5**, 325 (1930).
38. F. Bloch, *Ann. Phys.* **16**, 285 (1933).
39. К. Н. Мухин, *Экспериментальная ядерная физика, Т.1: Физика атомного ядра*, Лань, Москва (2002).
40. О. Б. Фирсов, *ЖЭТФ* **36**, 1517 (1959) [O. B. Firsov, *Sov. Phys. JETP* **9**, 1076 (1959)].
41. J. S. Briggs and A. P. Pathak, *J. Phys. C* **6**, L153 (1973).
42. M. Kitagawa and Y. H. Ohtsuki, *Phys. Rev. B* **9**, 4719 (1974).

# КОГЕРЕНТНОЕ УПРАВЛЕНИЕ НАСЕЛЕННОСТЯМИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ ПАРОЙ ПОЛУПЕРИОДНЫХ АТТОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ

*Р. М. Архипов<sup>a,b\*</sup>, О. О. Дьячкова<sup>a,b</sup>, П. А. Белов<sup>a</sup>, М. В. Архипов<sup>a,b</sup>, А. В. Пахомов<sup>a</sup>,  
Н. Н. Розанов<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный университет  
199034, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Физико-технический институт и.м. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 февраля 2024 г.,  
после переработки 27 февраля 2024 г.  
Принята к публикации 29 февраля 2024 г.

Изучение особенностей взаимодействия униполярных субцикловых импульсов с веществом показало необходимость как пересмотра стандартных теорий взаимодействия световых импульсов с веществом, так и введения новых понятий в оптику, таких как интерференция площадей импульсов. В настоящей работе на основании численного решения временного уравнения Шредингера изучены особенности нелинейной интерференции площадей импульсов при возбуждении частицы в прямоугольной потенциальной яме, возбуждаемой парой полупериодных, аттосекундных импульсов. Показано, что при изменении задержки между импульсами зависимость населенности связанных состояний от задержки имеет характерный вид биений, в отличие от простой гармонической зависимости, которая получается в случае малой амплитуды поля. Проведенные исследования напрямую показывают возможность управления квантовыми системами с помощью последовательности полупериодных импульсов, в частности возможность увеличения вероятности ионизации или ее полного подавления и возможность наведения решеток разности населенностей в многоуровневой среде.

DOI: 10.31857/S0044451024080029

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема сокращения длительности электромагнитных импульсов является актуальной с момента изобретения первых лазеров [1] и важна по сей день [2–10]. В настоящее время с помощью получаемых на практике электромагнитных импульсов фемто- и аттосекундной длительности стало возможным изучение динамики волновых пакетов в атомах, молекулах и наноструктурах [6–10]; так, недавняя Нобелевская премия по физике была присуждена именно за экспериментальные методы генерации световых аттосекундных импульсов для изучения динамики электронов в веществе [11].

Получаемые на практике с помощью метода генерации гармоник высокого порядка аттосекундные импульсы являются биполярными и содержат несколько полуволн напряженности электрического поля [6–10]. При фиксированном спектральном интервале излучения наименьшая длительность достигается у полупериодного (униполярного) импульса, который получается, если оставить только одну полуволну поля у многоциклового импульса [12]. Важной характеристикой униполярных импульсов является их электрическая площадь, определяемая как интеграл от напряженности поля по времени в заданной точке пространства [12]:

$$S_E(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\mathbf{r}, t) dt, \quad (1)$$

Импульсы с ненулевой электрической площадью могут быстро передавать механический импульс заряженной частице в одном направлении, что откры-

\* E-mail: arkhprovostislav@gmail.com

вает различные перспективы их применения для сверхбыстрого контроля квантовых систем, ускорения зарядов и пр., см. обзоры [12–14], монографию [15] и цитируемую литературу. Совокупность многих работ в этом направлении [16–26] привела к появлению нового, но пока еще не очень хорошо известного и порой сложного для восприятия исследователей направления — «оптики униполярных и субцикловых импульсов».

Если длительность таких импульсов короче характерных внутриатомных времен (период оборота электрона по боровской орбите в основном состоянии), то характер их взаимодействия с квантовыми системами существенно отличается от случая обычных биполярных многоцикловых импульсов (см. подробнее обзоры [12–15]). Многие привычные оптические явления в этом случае теряют смысл или происходят по иным сценариям. К примеру, невозможной оказывается интерференция света в привычном ее понимании [14, 15] или становится неприменимой теория фотоионизации Келдыша [27], которая справедлива для длинных многоцикловых импульсов и демонстрирует неплохую точность даже для предельно коротких импульсов длительностью в несколько периодов оптических колебаний с околорезонансной напряженностью электрического поля [28, 29].

Отметим, что воздействие как одиночных униполярных предельно коротких импульсов (ПКИ), так и последовательности таких импульсов на квантовые объекты недостаточно изучено на сегодняшний день. Для описания взаимодействия таких ПКИ с квантовыми системами потребовалось введение новых понятий. Как показывают результаты многочисленных исследований, воздействие одиночного ПКИ в случае, если его длительность  $\tau$  короче орбитального периода электрона в атоме (или характерного времени  $T_g$ , связанного с энергией частицы в основном состоянии  $E_g$ ,  $\tau < T_g = 2\pi\hbar/E_g$ ), на квантовую систему определяется электрической площадью импульса и ее атомной мерой, а не энергией импульса [30–34].

Ситуация становится более сложной при воздействии на систему последовательности ПКИ. Так, например, при возбуждении резонансных сред несколькими ПКИ из малого числа колебаний возможно формирование сложной картины многочастотного фотонного и комбинационного эха [35–37].

В случае, когда длительности импульсов и задержки между ними становятся сравнимы с внутриатомными временами, может возникать нетриви-

альная картина наложения вкладов отдельных импульсов. Не прибегая к сложным квантовомеханическим расчетам, удается получить ряд наглядных соотношений в случае воздействия импульсов малой амплитуды, когда применима обычная теория возмущений. Как показано нами ранее, в этом случае взаимодействие последовательности ПКИ с квантовыми системами может быть описано на основе недавно введенного понятия «интерференции электрических площадей импульсов» [38] (см. также обзор [14]). В этом случае населенности связанных состояний определяются суммой квадратов электрических площадей импульсов и интерференционным членом, что напоминает выражение для интенсивности света при интерференции пары монохроматических световых волн [39]. Отметим, что при взаимодействии электромагнитных волн с квантовыми системами можно говорить и об интерференции связанных состояний. Можно показать, что выражение для вероятности перехода системы из одного состояния в другое, опять же, формально похоже на классическое: сумму квадратов амплитуд базисных состояний системы и интерференционный член, осциллирующий на частоте перехода [40].

Другим возможным применением ПКИ является создание решеток разности населенностей с помощью последовательности импульсов в резонансной среде при их когерентном взаимодействии со средой, т. е. когда длительность импульсов и задержки между ними меньше времени релаксации поляризации среды  $T_2$ . Такие решетки разности населенностей ранее исследовались для квазимонохроматических импульсов, в частности для применений в экологографии [41–44]. В то же время такие решетки населенностей могут наводиться и с помощью предельно коротких импульсов [45–48]. В приближении, когда используются импульсы малой амплитуды и рассматриваемая среда достаточно разрежена (что позволяет пренебречь не только влиянием соседних атомов друг на друга, но и изменением формы падающих импульсов при распространении), возникновение данных решеток легко понять на основании введенного понятия интерференции площадей импульсов [35].

Все предыдущие исследования динамики решеток населенностей проводились с использованием различных приближений, таких как малоуровневое приближение резонансной среды или приближенное решение уравнения Шредингера в первом порядке теории возмущений [48]. В работе [49] изучалось когерентное возбуждение среды на основе модели одномерных квантовых ям бесконечной глубины, что

также является достаточно грубой идеализацией.

Несмотря на большое число появившихся в последнее время работ в области оптики униполярного субциклового света, ряд вопросов взаимодействия субцикловых ПКИ с квантовыми системами остаются неизученными. К таким вопросам относятся особенности уже нелинейной «интерференции площадей импульсов» при воздействии последовательности мощных ПКИ на квантовые системы, когда теория возмущений не применима и возможна сильная ионизация системы. Остается неизученным вопрос о возможности создания решеток населенностей в многоуровневых средах с учетом ионизации, которая может привести к существенному опустошению ямы и связанных состояний.

Поэтому в данной работе на основании прямого численного решения временного уравнения Шредингера изучается динамика возбуждения населенностей связанных состояний и вероятности ионизации частицы в одномерной прямоугольной квантовой яме конечной глубины, возбуждаемой парой аттосекундных импульсов, в зависимости от задержки между импульсами. В этом случае, в отличие от ранних исследований, рассматривается воздействие мощных импульсов, когда задержки между ними сравнимы с внутриаомными временами, что делает неприменимыми ни обычную теорию возмущений, ни приближение внезапных возмущений.

Используется простейшая модель одномерной квантовой ямы. Эта модель, несмотря на ее простоту, находит различные применения в физике взаимодействия сверхкоротких световых импульсов с квантовыми системами — атомами [50, 51], наноструктурами [52–54] и другими системами [55].

Изучаются особенности нелинейной интерференции площадей импульсов. На основании полученных результатов впервые обсуждается возможность создания решеток населенностей в протяженной многоуровневой разреженной среде с учетом ее ионизации при возбуждении парой не перекрывающихся в среде ПКИ.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РАССМАТРИВАЕМАЯ СИСТЕМА

Взаимодействие квантовых систем с полем внешних световых ПКИ описывается временным уравнением Шредингера для волновой функции электрона  $\Psi(x, t)$  [56]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\hat{H}_0 + V(t)] \Psi. \quad (2)$$

Здесь  $\hat{H}_0$  — собственный гамильтониан системы и

$V(t) = -dE(t)$  — энергия взаимодействия системы с полем внешних импульсов в дипольном приближении,  $d = qx$  — дипольный момент,  $q$  — заряд электрона,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка.

Система возбуждается парой аттосекундных ПКИ, имеющих вид

$$E_e(t) = E_1 \exp \left\{ \frac{-t^2}{\tau_1^2} \right\} \cos(\omega_1 t + \phi_1) + E_2 \exp \left\{ \frac{-t^2}{\tau_2^2} \right\} \cos(\omega_2 [t - \Delta] + \phi_2), \quad (3)$$

где  $t$  — время,  $E_{1,2}$  — амплитуды,  $\tau_{1,2}$  — длительности обоих импульсов соответственно,  $\omega_{1,2}$  — центральная частота импульсов,  $\phi_{1,2}$  — фаза (carrier envelope phase, CEP) (для ПКИ эти параметры имеют условный смысл),  $\Delta$  — задержка между действующими импульсами.

Простые соотношения для населенности связанных состояний можно получить только в приближении слабого поля в первом порядке теории возмущений. Тогда выражение для населенности может быть записано в виде

$$w_n = \frac{d_{1n}^2}{2\hbar^2} S_1^2 \exp \left\{ -\frac{\omega_{1n}^2 \tau_1^2}{2} \right\} \frac{\cos 2\phi_1 + \text{ch}(\omega_1 \omega_{1n} \tau_1^2)}{\cos^2 \phi_1} + \frac{d_{1n}^2}{2\hbar^2} S_2^2 \exp \left\{ -\frac{\omega_{1n}^2 \tau_2^2}{2} \right\} \frac{\cos 2\phi_2 + \text{ch}(\omega_2 \omega_{1n} \tau_2^2)}{\cos^2 \phi_2} + \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} S_1 S_2 e^{-\omega_{1n}^2 (\tau_1^2 + \tau_2^2)/4} \frac{1}{\cos \phi_1 \cos \phi_2} \times \left[ \cos \omega_{1n} \Delta \left( \cos(\phi_1 + \phi_2) \text{ch} \left( \frac{\omega_{1n} (\omega_1 \tau_1^2 - \omega_2 \tau_2^2)}{2} \right) + \cos(\phi_1 - \phi_2) \text{ch} \left( \frac{\omega_{1n} (\omega_1 \tau_1^2 + \omega_2 \tau_2^2)}{2} \right) \right) + \sin \omega_{1n} \Delta \left( \sin(\phi_1 + \phi_2) \text{sh} \left( \frac{\omega_{1n} (\omega_2 \tau_2^2 - \omega_1 \tau_1^2)}{2} \right) - \sin(\phi_1 - \phi_2) \text{sh} \left( \frac{\omega_{1n} (\omega_1 \tau_1^2 + \omega_2 \tau_2^2)}{2} \right) \right) \right], \quad (4)$$

где  $d_{1n}$  — дипольный момент перехода,  $\omega_{1n}$  — частота резонансного перехода, а также введены электрические площади обоих импульсов

$$S_{1,2} = \sqrt{\pi} E_{1,2} \tau_{1,2} \exp \left\{ -\frac{\omega_{1,2}^2 \tau_{1,2}^2}{4} \right\} \cos \phi_{1,2}.$$

Нетрудно увидеть, что населенность связанного состояния среды периодически зависит от задержки

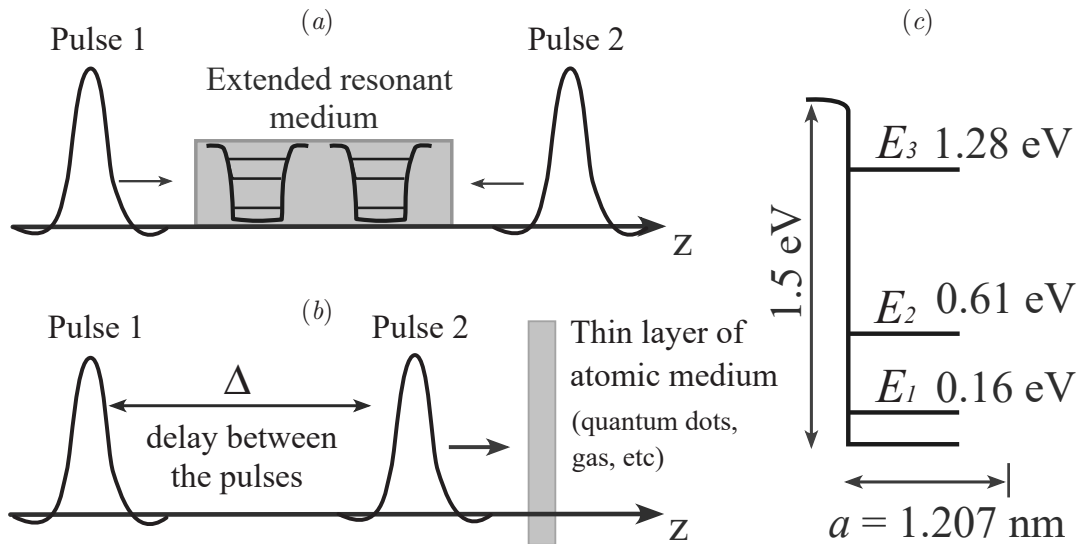


Рис. 1. *a* — Возбуждение протяженной среды парой ПКИ, распространяющихся навстречу друг другу; частицы среды показаны схематически в виде одномерных квантовых ям. *b* — Когерентное возбуждение тонкого слоя среды парой ПКИ, распространяющихся с некоторой задержкой  $\Delta$  относительно друг друга. *c* — Схематичное изображение рассматриваемой квантовой ямы

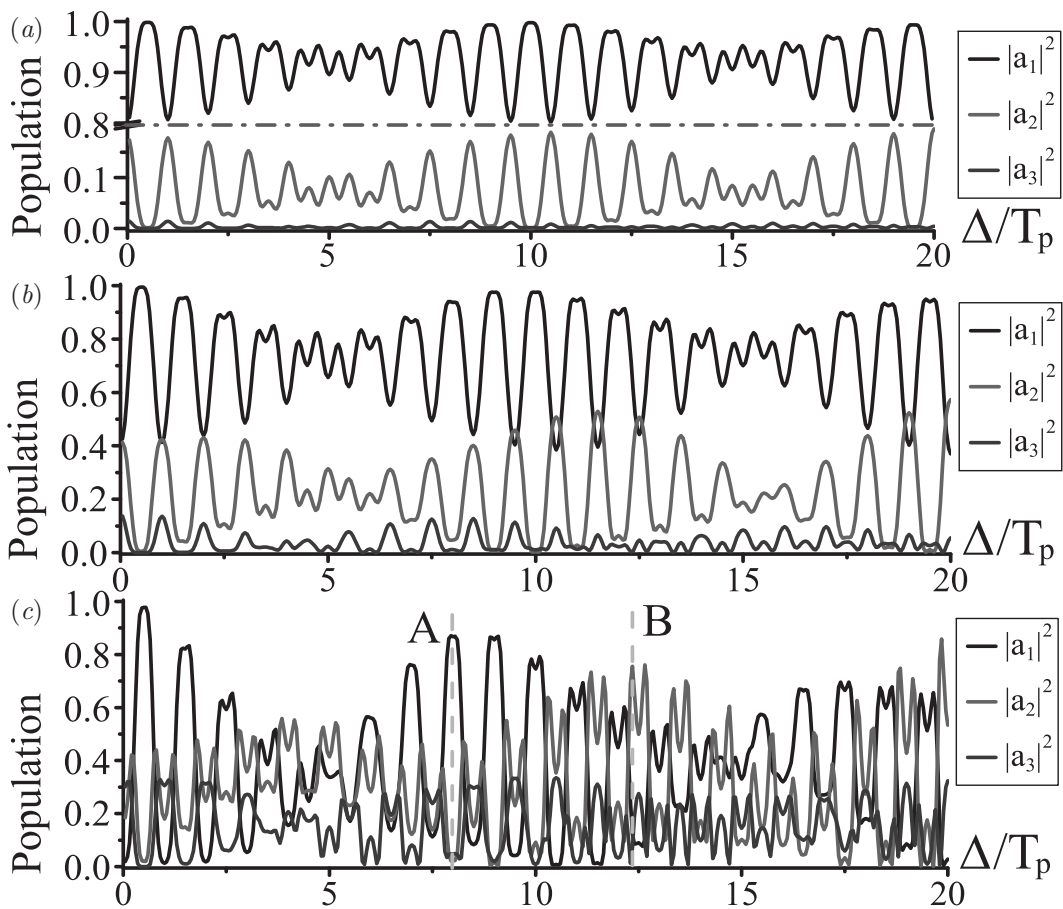


Рис. 2. Зависимости населенностей связанных состояний  $|a_i|^2$  в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины от задержки между импульсами  $\Delta/T_p$  при амплитуде импульсов  $E_{02} = 5 \cdot 10^7$  В/см (*a*),  $E_{03} = 1 \cdot 10^8$  В/см (*b*),  $E_{04} = 2 \cdot 10^8$  В/см (*c*)



Таблица 1. Параметры импульсов и модели квантовой ямы, использованные при расчетах

Varying Pulse Parameters			Quantum Well Parameters			
$E_{0i}, \text{В/см}$	$S_{0i}, \text{В} \cdot \text{с/см}$	$T_e, \text{фс}$	$E_d = 1.5 \text{ эВ}$		$a = 1.207 \text{ нм}$	
$1 \cdot 10^7$	$1.07 \cdot 10^{-9}$	128.04	$S_a = 1.09 \cdot 10^{-8}, \text{В} \cdot \text{с/см}$			
$5 \cdot 10^7$	$5.36 \cdot 10^{-9}$	25.61	$E, \text{эВ}$	$T_i, \text{фс}$	$\omega_i, 10^{14} \text{ рад/с}$	
$1 \cdot 10^8$	$1.07 \cdot 10^{-8}$	12.80	$E_1$	0.1547	26.73	2.35
$2 \cdot 10^8$	$2.14 \cdot 10^{-8}$	6.40	$E_2$	0.6128	6.75	9.31
$3 \cdot 10^8$	$3.22 \cdot 10^{-8}$	4.27	$E_3$	1.2784	3.24	19.42

между импульсами  $\Delta$  и определяется суммой квадратов электрических площадей  $S_{1,2}$ . В этом смысле можно говорить об интерференции площадей импульсов, как обсуждалось ранее в работе [38]. В простейшем случае, при одинаковых параметрах импульсов, т. е.

$$E_1 \neq E_2, \quad \tau_1 = \tau_2 = \tau, \\ \omega_1 = \omega_2 = \omega, \quad \phi_1 = \phi_2 = \phi,$$

выражение (4) сводится к виду

$$w_n = \frac{d_{1n}^2}{2\hbar^2} \exp \left\{ -\frac{\omega^2 \tau^2}{4} \right\} \frac{\cos 2\phi + \text{ch } \omega \omega_{1n} \tau_1^2}{\cos^2 \phi} \times \\ \times \left( S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 S_2 \cos \omega_{1n} \Delta \right).$$

Как показано ранее [45–48], случай протяженной и разреженной среды (рис. 1а) позволяет пренебречь как влиянием соседних атомов друг на друга, так и изменением формы импульсов при распространении. Выражение (5) наиболее наглядно описывает интерференцию электрических площадей пары возбуждающих ПКИ, воздействующих на квантовую систему.

Выражение (5) также указывает на возможность создания решетки населенностей с помощью пары импульсов, распространяющихся навстречу друг другу без одномоментного перекрытия в среде. В случае же единичной структуры (тонкий слой) (рис. 1б) выражение (5) показывает возможность управления возбуждением квантовых систем с помощью пары ПКИ при изменении задержки между ними. Очевидно, данное рассмотрение является приближенным и не позволяет учесть влияние ионизации среды на населенность связанных состояний.

Рассмотрим модель в виде одномерной потенциальной ямы конечной глубины. Несмотря на простоту, такая модель используется при описании металлических наночастиц и полупроводниковых на-

ноструктур [52–54]. Потенциальная энергия частицы в таком случае записывается в виде

$$U(x) = 0, \quad |x| > \frac{a}{2}, \\ U(x) = -E_d, \quad |x| \leq \frac{a}{2}.$$

Параметры расчета имели следующие значения: ширина ямы  $a = 1.2 \text{ нм}$ , глубина  $E_d = 1.5 \text{ эВ}$ ; в яме существуют три связанных состояния частицы с энергиями  $E_1 = 0.1574 \text{ эВ}$ ,  $E_2 = 0.6128 \text{ эВ}$ ,  $E_3 = 1.278 \text{ эВ}$  (связанные с ними характерные частоты ( $\omega_i = E_i/\hbar$ ) и времена  $T_i$  приведены в табл. 1), что соответствует длинам волн переходов  $\lambda_{12} = 2706.49 \text{ нм}$  ( $T_{12} = 9.03 \text{ фс}$ ) и  $\lambda_{13} = 1103.36 \text{ нм}$  ( $T_{13} = 3.68 \text{ фс}$ ); см. рис. 1с. Параметры ямы были выбраны таким образом, чтобы длина волны перехода из основного в первое возбужденное состояние составляла порядка нескольких микрометров, что типично, например, для квантовых точек.

Величина  $\omega$  составляла  $14 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}$  (длина волны  $\lambda_a = 134.6 \text{ нм}$ ), период  $T_p = 2\pi/\omega = 448.8 \text{ ас}$ , фаза  $\phi = 0$ , длительность импульсов возбуждения  $\tau = 0.2T_p \approx 89.7 \text{ ас}$ . Импульсы такой длительности, с амплитудами порядка  $\sim 10^8 \text{ В/см}$  могут быть получены в различных нелинейных процессах [7, 20–26]. Амплитуда варьировалась, см. табл. 1. Решение временного уравнения Шредингера проводилось численно методом Кранка – Николсона [57].

### 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПАРЫ ПКИ С ЕДИНИЧНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМОЙ

В данном разделе мы рассмотрим взаимодействие пары ПКИ с единичной квантовой ямой (оптически тонким слоем). Эта ситуация схематически изображена на рис. 1а. Рисунок 2 иллюстрирует зависимость населенностей связанных состояний после окончания действия импульсов от амплитуды

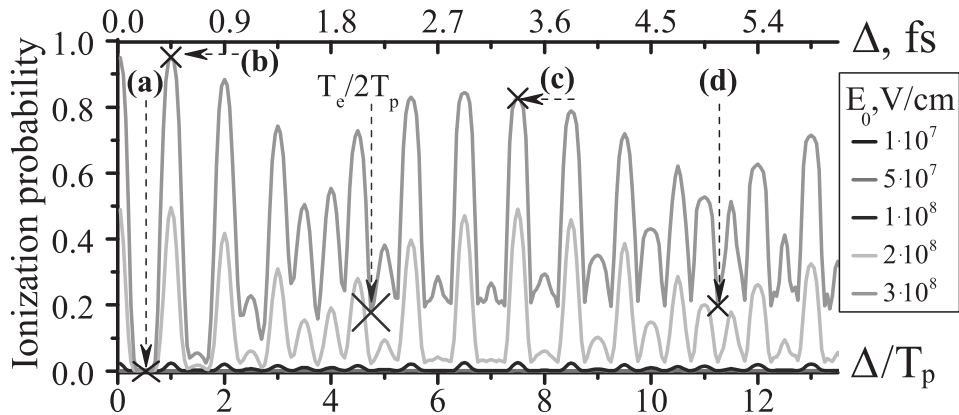


Рис. 3. Зависимости вероятности ионизации частиц в рассматриваемой квантовой яме от задержки между импульсами  $\Delta$  при различных амплитудах импульсов  $E_0$  [В/см]

поля  $E_0$  и задержки между импульсами  $\Delta$ , отнесенной к  $T_p$ . Видна сложная форма этой зависимости; и при увеличении амплитуды  $E_0$  она становится все более «пиковой», отличающейся от простой гармонической, предсказанной выше формулой (4). Видно, что поведение населенности имеет схожий вид до некоторого порога интенсивности импульсов.

Зависимости выше показывают возможность сверхбыстрого управления связанными состояниями в квантовых ямах и создания инверсии населенностей в них с помощью пары ПКИ. К примеру, при подборе параметров удастся максимизировать населенность одного из состояний, не влияя на населенность остальных, см. указатели А и В на рис. 2с. Так, для А при  $\Delta/T_p = 8$  возможно получить значения  $|a_1|^2 = 0.87$ ,  $|a_2|^2 = 0.02$  и  $|a_3|^2 = 0.05$ ; а в точке В при  $\Delta/T_p = 12.35$  населенности связанных уровней  $|a_1|^2 = 0.12$ ,  $|a_2|^2 = 0.75$  и  $|a_3|^2 = 0.07$ . Ранее такая возможность уже была показана в атомно-молекулярных системах [46, 48].

#### 4. УПРАВЛЕНИЕ ИОНИЗАЦИЕЙ ЧАСТИЦЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ С ПОМОЩЬЮ ПАРЫ ПКИ

Рисунок 3 иллюстрирует зависимость вероятности ионизации

$$w_i = 1 - (|a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2)$$

от интенсивности импульсов  $E_0$  и задержки между ними  $\Delta$ . В случае

$$E_0 = 1 \cdot 10^7 - 1 \cdot 10^8 \text{ В/см}$$

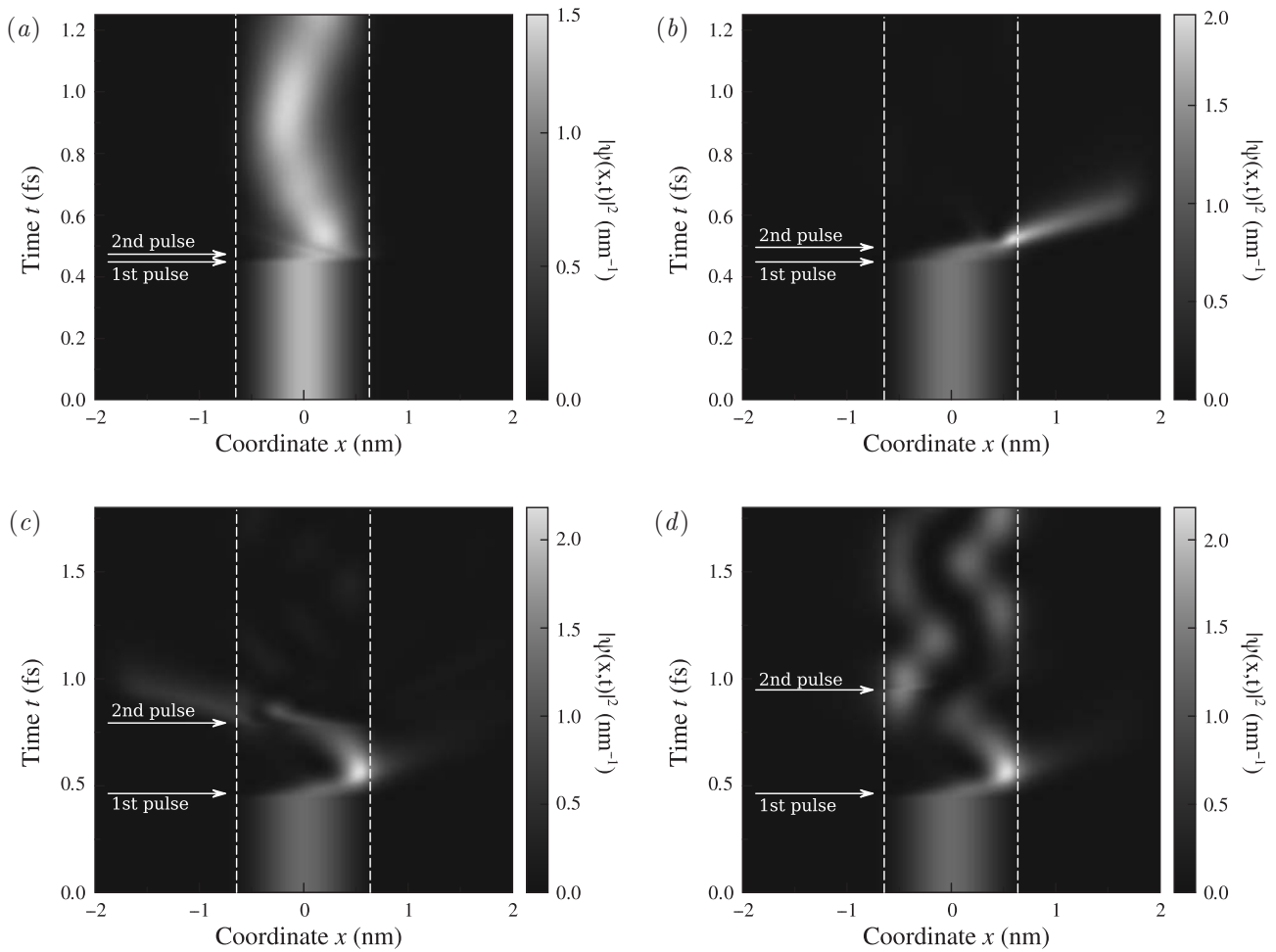
величина ионизации не превышает 0.025; а для больших значений амплитуд можно подобрать величину задержки, минимизирующую ионизацию. Интересно отметить, что для  $E_{04} = 2 \cdot 10^8$  В/см и

$E_{05} = 3 \cdot 10^8$  В/см ионизация достигает минимального значения на участке  $0.35 < \Delta/T_p < 0.75$ , после минимальное значение инверсии выходит на «плато»; максимальное значение достигается при  $\Delta/T_p = 1$ , точка (b) на рис. 3. Таким образом, меняя отношение  $\Delta/T_p$  в малом диапазоне от 0.75 до 1, мы можем как исключить ионизацию системы, так и полностью вывести частицы из ямы.

Рассмотрим подробнее ионизацию частиц в квантовой яме для наиболее наглядного случая —  $E_{05} = 3 \cdot 10^8$  В/см. Для этого выберем четыре точки, отмеченных на рис. 3, и проследим за временной эволюцией волнового пакета для случаев максимума и минимума ионизации при различных значениях отношения  $\Delta/T_p$ . На рис. 4a,b представлены абсолютные минимум и максимум для ионизации частиц в квантовой яме; при этом  $\Delta \sim T_p$ , т.е. импульсы еще рядом и могут действовать как один, интерферируя при этом. На рис. 4c представлен локальный минимум ионизации; на рис. 4d — локальный максимум; для этих случаев  $\Delta > T_p$ , импульсы не перекрываются.

Обратим внимание на рис. 4b — случай абсолютного максимума ионизации, и рис. 4c — случай локального максимума. Видно, что некоторое время спустя после действия второго импульса на рис. 4c мы еще наблюдаем некоторое распределение волнового пакета внутри ямы, в то время как на рис. 4b — практически нет. Видно, что в случае рис. 4a волновой пакет начинает медленные колебания, при этом оставаясь полностью в рамках ямы, а на рис. 4d наблюдается сложное поведение волновой функции, хотя большая ее часть заключена в границах ямы.

Говорить о периодическом движении волнового пакета можно, пока он не сильно исказился (расплылся). Характерное время расплывания (аналог



**Рис. 4.** Распространение волнового пакета в рассматриваемой квантовой яме при амплитуде взаимодействующих импульсов  $E_{05} = 3 \cdot 10^8$  В/см и различных значениях задержки  $\Delta$ :  $\Delta/T_p = 0.5$  (a), 1 (b), 7.5 (c), 11.25 (d); эти же точки отмечены на рис. 3. Стрелками обозначены моменты действия импульсов

дифракционной длины) можно получить из уравнения Шредингера для свободного электрона:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi.$$

Полагаем по порядку величины

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \sim \frac{\Psi}{T_d}, \quad \nabla^2 \Psi \sim \frac{\Psi}{a^2}.$$

Тогда  $T_d \sim 2ma^2/\hbar$  или  $T_d \approx 25.8$  фс, что много больше рассматриваемых времен.

Связь населенностей связанных состояний системы с параметрами воздействующих импульсов можно описать, сравнив площадь электрического импульса  $S_E$  с характерным атомным масштабом системы  $S_a$  [33, 34].  $S_E$  является количественной мерой воздействия падающего импульса на систему, а именно: опустошения основного состояния и возбуждения верхних уровней; значения площади  $S_{E_i}$

для каждого значения амплитуды  $E_{0i}$  приведены в табл. 1. Используя введенное в работе [33] определение атомной меры электрической площади, для рассматриваемой в данной работе квантовой ямы получим  $S_a = 2\hbar/ea = 1.09 \cdot 10^{-8}$  В · с/см.

Для  $E_{01}$  и  $E_{02}$  атомная мера электрической площади больше электрической площади взаимодействующих с ней импульсов,  $S_a > S_{E_i}$ . Действительно, на рис. 2a видно, что импульс почти не оказывает влияния на населенность возбужденных состояний, а лишь незначительно заселяет основное,  $|a_1|^2$ ; не наблюдается и ионизации, см. рис. 3. На рис. 2b, где  $S_a > S_{E_3}$ , видно значительную заселенность состояний, и на рис. 5a есть инверсия населенностей. Ионизация присутствует, но не оказывает ощутимого эффекта на систему. Для импульсов с амплитудой  $E_{04}$  и  $E_{05}$  выполняется соотношение  $S_a < S_{E_i}$ , см. табл. 1, и, как следствие, наблюдается значительная

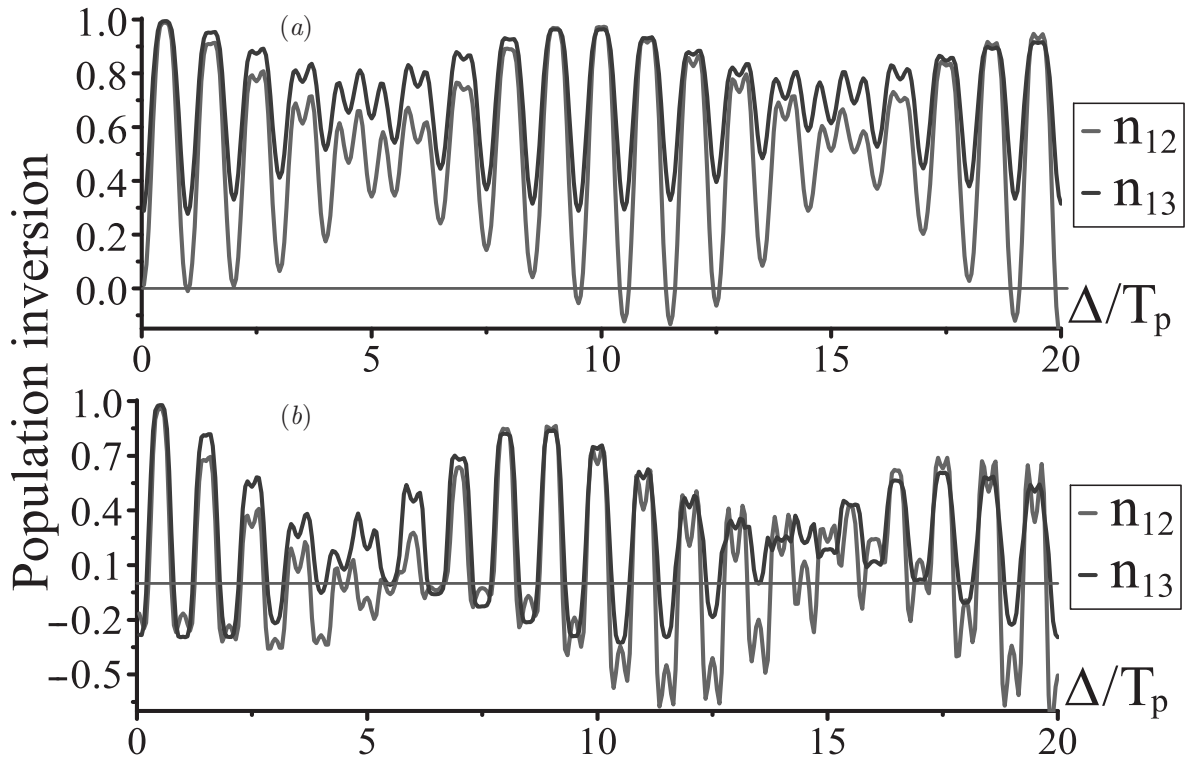


Рис. 5. Зависимости инверсии населенностей частиц  $n$  в конечной яме от задержки между импульсами  $\Delta/T_p$  при амплитуде импульсов  $E_{03} = 1 \cdot 10^8$  В/см (а),  $E_{04} = 2 \cdot 10^8$  В/см (б)

ионизация (полная для  $E_{05}$ , рис. 3) и разность населенностей связанных состояний, см. рис. 5b.

Попробуем объяснить зависимость ионизации от задержки между импульсами с другой стороны. Пусть первый импульс передает электрону в яме импульс величиной  $p_i = eS_{E_i}$ ; соответствующий волновой пакет будет двигаться между стенками ямы со скоростью  $V_i = p_i/m_e$ . В простейшей рассматриваемой модели движение электрона в яме после первого «толчка» будет периодическим, с периодом  $T_e = 2a/V_i$ , или  $T_e[\text{с}] = 1.3727 \cdot 10^{-22}/S_{E_i}$  [В · с/см]; этим же периодом характеризуется и зависимость от задержки второго импульса. Полученные значения периода  $T_e$  вынесены в табл. 1. Видно, что они на 1–3 порядка больше величины  $T_p$ . Для  $E_{04} = 2 \cdot 10^8$  В/см отношение  $T_e/2T_p = 7.13$ ; для  $E_{05} = 3 \cdot 10^8$  В/см отношение  $T_e/2T_p = 4.75$ ; последнее отмечено точкой на рис. 3. Это локальные минимумы, не абсолютные.

### 5. СОЗДАНИЕ РЕШЕТОК НАСЕЛЕННОСТЕЙ В ПРОТЯЖЕННОЙ СРЕДЕ ИЗ КВАНТОВЫХ ЯМ

В данном разделе мы рассмотрим возможность создания решеток населенностей в протяженной среде на основе квантовых ям с помощью пары им-

пульсов, следующих навстречу друг другу и не перекрывающихся в среде, см. рис. 1a. Ранее было показано, что задача о воздействии пары таких импульсов на протяженную среду может быть сведена к задаче о воздействии пары ПККИ на единичный квантовый объект с переменной задержкой между импульсами, как на рис. 1, в случае, когда плотность частиц мала, что позволяет пренебречь изменением формы импульсов при распространении в среде и влиянием соседних атомов друг на друга, см. [45, 46, 48]. Под задержкой  $\Delta \sim z/c$  следует понимать момент прихода второго импульса в среду в точку с координатой  $z$ ,  $c$  — скорость света, поэтому ниже мы также используем результаты предыдущего раздела. Результаты такого упрощенного рассмотрения согласуются с результатами, полученными на основании численного решения системы уравнений Максвелла–Блоха с учетом эффектов распространения импульсов в протяженной среде [45, 46, 48].

Для подробного анализа остановимся на данных для амплитуды импульсов  $E_{03} = 1 \cdot 10^8$  В/см и  $E_{04} = 2 \cdot 10^8$  В/см, рис. 2; в этом случае видны значительные величины населенности и отсутствует большая ионизация, см. рис. 3. Результирующая зависимость инверсии населенностей  $n_{1i} = |a_1|^2 - |a_i|^2$  от

Таблица 2. Параметры аппроксимации инверсии населенностей  $n$ , полученных с помощью фурье-преобразования зависимостей на рис. 5

$E_0$	$E_0 = 1 \cdot 10^8 \text{ В/см}$		$E_0 = 2 \cdot 10^8 \text{ В/см}$			
	$n_{12}$	$n_{13}$	$n_{12}$		$n_{13}$	
$C$	0.53	0.7	0.09		0.24	
Частота $\nu_i, T_p/\Delta$	$a_i$		$a_i$	Фаза $\phi$ , рад	$a_i$	Фаза $\phi$ , рад
	0.0242	—	0.1182	4.5113	0.0475	4.482
0.15	0.0212	—	0.1043	1.4241	0.0388	1.78
0.90	—	0.0134	—	—	0.0559	1.92
0.95	0.3061	0.1826	0.3629	0.4018	0.3217	0.1443
1.05	0.2655	0.1606	0.2909	0.3223	0.2745	0.424
1.10	—	0.0119	—	—	0.0425	1.2315
1.90	—	—	0.0632	-3.9111	—	—
2.00	0.0980	0.0817	0.0746	-2.6365	0.0313	0.5828
2.95	—	—	0.1218	-1.8758	0.0447	-2.7384
3.05	—	—	0.1043	3.7552	0.0375	-1.817

отношения задержки между импульсами  $\Delta$  к длине импульсов  $T_p$  представлена на рис. 5.

На рис. 5а отчетливо видны гармонические биения; попробуем описать эту зависимость в виде

$$n = C - \sum_{i=1}^n a_i \cos\left(2\pi \frac{\Delta}{T_p} \nu_i\right)$$

с помощью численного фурье-преобразования данных. Полученные нами коэффициенты  $C$ , безразмерные частоты  $\nu_i$  (эквивалентны значению отношения  $T_p/\Delta$ ) и их амплитуды  $a_i$  представлены в табл. 2.

На графике рис. 5b биения уже с более сложной зависимостью, поэтому при описании будем учитывать и фазу  $\theta_i$ :

$$n = C - \sum_{i=1}^n a_i \cos\left(2\pi \frac{\Delta}{T_p} \nu_i + \theta_i\right),$$

коэффициенты  $C, a_i, \theta_i$  и частоты  $\nu_i$  также представлены в табл. 2.

Хотя формула (4) предсказывает простую гармоническую зависимость на частоте  $\nu_i = T_p/\Delta = 1$ , расчеты в обоих случаях показывают, что она отсутствует в спектре. Вместо этого главный вклад дают две компоненты около нее с малой отстройкой:  $T_p/\Delta = 0.95$  и  $T_p/\Delta = 1.05$ , или  $T_p/\Delta = 1 \pm \delta$ , где  $\delta \sim 0.05$ , что соответствует  $T_p - \delta = 21\text{--}24$  ас, порядка одной атомной единицы (24.189 ас). Сложение двух этих колебаний с близкими частотами и порождает биения.

Также можно предположить, что низкие частоты ( $\nu_i = 0.1$  и  $\nu_i = 0.15$ ) появляются из-за связи с характерными временами переходов, соответствующие отношения имеют вид

$$\frac{T_p}{T_{13}} \approx 0.12, \quad \frac{T_p}{T_{12}} \approx 0.05, \quad \frac{T_p}{T_{23}} \approx 0.08.$$

Наличие дополнительных частот, отстройку и, в случае большой амплитуды поля, появление значительного сдвига фазы  $\theta_i$  объяснить сложно; многочастотный отклик характерен для квантовых систем в сильных полях; нельзя недооценивать и сложную картину нелинейной интерференции.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе одномерной модели частицы в прямоугольной яме изучен отклик системы на пару полцикловых аттосекундных импульсов. С помощью численного решения временного уравнения Шредингера изучены зависимости населенностей связанных состояний и вероятности ионизации от задержки между импульсами. Показано, что эта зависимость имеет вид биений и с ростом амплитуды поля она принимает более сложную пиковую структуру. В этом заключается проявление нелинейной интерференции площадей импульсов в сильных полях и ее отличие от линейного случая, когда зависимость населенностей от задержки между импульсами является гармонической и определяется выражениями (4) и (5).

Результаты расчетов показали возможность как увеличения, так и подавления ионизации частицы в яме при изменении задержки между импульсами, что в случае разреженной протяженной многоуровневой среды качественно предсказывает возможность наведения пространственной решетки разности населенностей. Полученные в работе результаты показывают возможность применения последовательности полуволновых импульсов для сверхбыстрого управления динамикой волновых пакетов в веществе и тем самым открывают новые направления в оптике униполярного света.

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта 21-72-10028 (динамика населенностей в квантовых ямах в сильных полях). Исследования М. В. Архипова и Н. Н. Розанова поддержаны Государственным заданием ФТИ им. А. Ф. Иоффе, тема 0040-2019-0017 (возможность создания решеток населенностей).

## ЛИТЕРАТУРА

- U. Keller, *Nature* **424**, 831 (2003), DOI: 10.1038/nature01938.
- T. Gaumnitz, A. Jain, Y. Pertot, M. Huppert, I. Jordan, F. Ardana-Lamas, and H. J. Worner, *Opt. Express* **25**, 27506 (2017), DOI: 10.1364/OE.25.027506.
- H. Y. Kim, M. Garg, S. Mandal, S. Mandal, L. Seifert, T. Fennel, and E. Goulielmakis, *Nature* **613**, 662 (2023), DOI: 10.1038/s41586-022-05577-1.
- E. A. Хазанов, КЭ **52**, 208 (2022) [E. A. Khazanov, *Quant. Electron.* **52**, 208 (2022), DOI: 10.1070/QEL18001].
- K. Midorikawa, *Nature Photon.* **16**, 267 (2022), DOI: 10.1038/s41566-022-00961-9.
- D. Hui, H. Alqattan, S. Yamada, V. Pervak, K. Yabana, and M. Hassan, *Nature Photon.* **16**, 33 (2022), DOI: 10.1038/s41566-021-00918-4.
- F. Calegari, G. Sansone, S. Stagira, C. Vozzi, and M. Nisoli, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **49**, 062001 (2016), DOI: 10.1088/0953-4075/49/6/062001.
- G. Inzani, L. Adamska, A. Eskandari-asl, N. Di Palo, G. Luca Dolso, B. Moio, L. Jacopo D'Onofrio, A. Lamperti, A. Molle, R. Borrego-Varillas, M. Nisoli, St. Pittalis, C. A. Rozzi, A. Avella, and M. Lucchini, *Nature Photon.* **17**, 1059 (2023), DOI: 10.1038/s41566-023-01274-1.
- D. Ertel, D. Busto, I. Makos, M. Schmoll, J. Benda, H. Ahmadi, M. Moiola Frassetto et al., *Sci. Adv.* **9**, 7747 (2023), DOI: 10.1126/sciadv.adh7747.
- М. Ю. Рябикин, М. Ю. Емелин, В. В. Стрелков, УФН **193**, 382 (2023), DOI: 10.3367/UFNr.2021.10.039078 [M. Yu. Ryabikin, M. Yu. Emelin, and V. V. Strelkov, *Phys. Usp.* **66**, 360 (2023), DOI: 10.3367/UFNe.2021.10.039078].
- NobelPrize.org, Nobel Prize Outreach AB 2023, Press Release (accessed: 4 Oct 2023) URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2023/press-release>.
- Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, КЭ **50**, 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *Quant. Electron.* **50**, 801 (2020), DOI: 10.1070/QEL17348].
- С. В. Сазонов, Опт. и спектр. **130**, 1846 (2022), DOI: 10.21883/OS.2022.12.54090.45-22 [S. V. Sazonov, *Opt. Spectr.* **130**, 1573 (2022), DOI: 10.21883/EOS.2022.12.55244.45-22].
- Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, П. А. Образцов, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **117**, 10 (2023), DOI: 10.31857/S1234567823010020 [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, P. A. Obraztsov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **117**, 8 (2023), DOI: 10.1134/S0021364022602652].
- Н. Н. Розанов, М. В. Архипов, Р. М. Архипов, А. В. Пахомов, Коллективная монография «Терагерцовая фотоника», под ред. В. Я. Панченко, А. П. Шкуринов, Российская академия наук, Москва (2023), с. 360.
- С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **116**, 25 (2022), DOI: <https://doi.org/10.31857/S1234567822130043> [S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **116**, 22 (2022)].
- A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, and A. M. Popov, *Phys. Rev. E* **105**, 055203 (2022), DOI: 10.1103/PhysRevE.105.055203.
- A. Pakhomov, N. Rosanov, M. Arkhipov, and R. Arkhipov, *Optics Lett.* **48** (24), 6504 (2023), DOI: 10.1364/OL.503802.
- I. E. Ilyakov, B. V. Shishkin, E. S. Efimenko, S. B. Bodrov, and M. I. Bakunov, *Opt. Express* **30**, 14978 (2022), DOI: 10.1364/OE.455768.
- M. T. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Nature* **530**, 66 (2016), DOI: 10.1038/nature16528.
- H.-C. Wu and J. Meyer-ter Vehn, *Nature Photon.* **6**, 304 (2012), DOI: 10.1038/nphoton.2012.76.

22. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, *Sci. Rep.* **8**, 2669 (2018), DOI: 10.1038/s41598-018-21052-2.
23. S. Wei, Y. Wang, X. Yan, and B. Eliasson, *Phys. Rev. E* **106**, 025203 (2022), DOI: 10.1103/PhysRevE.106.025203.
24. Q. Xin, Y. Wang, X. Yan, and B. Eliasson, *Phys. Rev. E* **107**, 035201 (2023), DOI: 10.1103/PhysRevE.107.035201.
25. L. Feng, J. McCain, and Y. Qiao, *Laser Phys.* **31**, 055301 (2021), DOI: 10.1088/1555-6611/abf241.
26. Y. Shou, R. Hu, Z. Gong, J. Yu, J. erh Chen, G. Mourou, X. Yan, and W. Ma, *New J. Phys.* **23**, 053003 (2021), DOI: 10.1088/1367-2630/abf612.
27. Л. В. Келдыш, *УФН* **187**, 1280 (2017) [L. V. Keldysh, *Phys. Usp.* **60**, 1187 (2017), DOI: 10.3367/UFNe.2017.10.038229].
28. А. В. Андреев, С. Ю. Стремоухов, О. А. Шутова, *ЖЭТФ* **138**, 1060 (2010) [A. V. Andreev, S. Y. Stremoukhov, and O. A. Shutova, *JETP Lett.* **111**, 936 (2010)].
29. А. В. Андреев, С. Ю. Стремоухов, О. А. Шутова, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 522 (2011) [A. V. Andreev, S. Y. Stremoukhov, and O. A. Shutova, *JETP Lett.* **93**, 476 (2011)].
30. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 464 (2016) [D. N. Makarov and V. I. Matveev, *JETP Lett.* **103**, 415 (2016)].
31. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 851 (2016) [D. N. Makarov and V. I. Matveev, *JETP Lett.* **103**, 756 (2016)].
32. R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Opt. Lett.* **44**, 1202 (2019).
33. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 156 (2021), DOI: 10.31857/S1234567821150039 [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **114**, 129 (2021), DOI: 10.1134/S0021364021150029].
34. N. Rosanov, D. Tumakov, M. Arkhipov, and R. Arkhipov, *Phys. Rev. A* **104**, 063101 (2021), DOI: 10.1103/PhysRevA.104.063101.
35. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 887 (1998) [A. Y. Parkhomenko and S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **67**, 934 (1998)].
36. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, *ЖЭТФ* **123**, 919 (2003) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, *JETP* **96**, 807 (2003)].
37. Н. В. Знаменский, С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 440 (2007) [N. V. Znamenskii and S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **85**, 358 (2007), DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364007080036>].
38. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *Laser Phys.* **32**, 066002 (2022), DOI: 10.1088/1555-6611/acbase.
39. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, Москва (1973) [M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, Pergamon Press, Oxford (1980)].
40. Е. Б. Александров, *УФН* **107**, 595 (1972) [E. B. Aleksandrov, *Sov. Phys. Usp.* **15**, 436 (1973)], DOI: 10.1070/PU1973v015n04ABEH004991].
41. В. В. Самарцев, Е. И. Штырков, *ФТТ* **18**, 3140 (1976).
42. Е. И. Штырков, В. В. Самарцев, *Опт. и спектр.* **40**, 392 (1976).
43. С. А. Моисеев, Н. Л. Невельская, Е. И. Штырков, *Опт. и спектр.* **79**, 382 (1995).
44. Е. И. Штырков, *Опт. и спектр.* **114**, 105 (2013), DOI: 10.7868/S0030403413010236 [E. I. Shtyrkov, *Opt. Spectr.* **114**, 96 (2013)].
45. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Sci. Rep.* **7**, 12467 (2017).
46. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Sci. Rep.* **11**, 1961 (2021), DOI: 10.1038/s41598-021-81275-8.
47. S. Zhang, S. Li, Y. Bai, and K. Huang, *J. Nanophoton.* **17**, 016013 (2023), DOI: 10.1117/1.JNP.17.016013.
48. Р. М. Архипов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 636 (2021), DOI: 10.31857/S1234567821100025 [R. M. Arkhipov, *JETP Lett.* **113**, 611 (2021)].
49. Р. М. Архипов, П. А. Белов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Опт. и спектр.* **130**, 969 (2022), DOI: 10.21883/OS.2022.06.52641.3098-21 [R. M. Arkhipov, P. A. Belov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *Opt. Spectr.* **130**, 772 (2022), DOI: 10.21883/EOS.2022.06.54715.3098-21].
50. Q. Su and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **44**, 599 (1991), DOI: 10.1103/physreva.44.5997.

51. Н. Р. Врублевская, Д. Е. Шипило, И. А. Николаева, Н. А. Панов, О. Г. Косарева, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 400 (2023), DOI: 10.31857/S1234567823060022 [N. R. Vrublevskaya, D. E. Shipilo, I. A. Nikolaeva, N. A. Panov, and O. G. Kosareva, *JETP Lett.* **117**, 408 (2023); DOI: 10.1134/S0021364023600301].
52. Ж. И. Алферов, *ФТП* **32**, 3 (1998) [*Zh. I. Alferov, Semiconductors* **32**, 1 (1998), DOI: 10.1134/1.1187350].
53. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science (2005).
54. L. Shi, I. Babushkin, A. Husakou, O. Melchert, B. Frank, J. Yi, G. Wetzl, A. Demircan, C. Lienau, H. Giessen, M. Ivanov, U. Morgner, and M. Kovacev, *Laser Photon. Rev.* **15**, 2000475 (2021), DOI: 10.1002/lpor.202000475.
55. M. Belloni and R. W. Robinett, *Phys. Rep.* **540**, 25 (2014).
56. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon (1974)].
57. J. Crank and P. Nicolson, *Math. Proc. of the Cambridge Philosophical Society* **43**, 50 (1947), DOI: 10.1017/S0305004100023197.



# КОГЕРЕНТНОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПОЛУЦИКЛОВОГО СВЕТОВОГО ИМПУЛЬСА В ТРЕХУРОВНЕВОЙ СРЕДЕ

*Р. М. Архипов<sup>a,b\*</sup>, А. В. Пахомов<sup>a</sup>, М. В. Архипов<sup>a,b</sup>, Н. Н. Розанов<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет  
199034, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>b</sup> *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 4 марта 2024 г.,  
после переработки 23 марта 2024 г.  
Принята к публикации 29 марта 2024 г.

На основании численного решения системы уравнений Максвелла–Блоха изучается динамика когерентного распространения униполярного, полуциклового, светового импульса аттосекундной длительности в трехуровневой резонансно-поглощающей среде. Проведено сравнение с распространением такого импульса в двухуровневой среде. Показано, что импульс, который ведет себя подобно  $4\pi$ -импульсу в двухуровневой среде, в трехуровневой среде подобен  $6\pi$ -импульсу и расщепляется на три подимпульса, распространяющихся с разной скоростью в среде. Исследованное явление позволяет более детально понять до сих пор недостаточно изученную динамику когерентного распространения полуциклового импульсов в резонансной среде.

DOI: 10.31857/S0044451024080030

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время активно изучается вопрос получения униполярных полуциклового импульсов, содержащих полуволну поля одной полярности и обладающих большой электрической площадью, определяемой как [1–3]

$$S_E(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\mathbf{r}, t) dt. \quad (1)$$

Здесь  $E(\mathbf{r}, t)$  — напряженность электрического поля,  $t$  — время,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор. Интерес к таким импульсам связан с возможностью однонаправленного воздействия на заряды, что дает возможность быстро передавать механический импульс заряженной частице, и, следовательно, такие импульсы могут быть использованы для сверхбыстрого возбуждения квантовых систем, ускорения зарядов и других приложений [4, 5].

Электрическая площадь таких импульсов является их важной характеристикой, так как она удо-

влетворяет правилу сохранения в диссипативных средах в одномерном случае плосковолнового распространения вдоль оси  $z$ :  $dS_E/dz = 0$  [3, 6]. И с другой стороны, именно она определяет степень воздействия на квантовые системы, если длительность импульса менее характерного времени, связанного с энергией основного состояния (орбитального периода электрона в атоме) [7–14]. На сегодняшний день предложено ряд способов получения импульсов, по форме близких к униполярным, имеющих выраженную полуволну поля одной полярности [15–23]. Обзор недавних исследований в области получения таких импульсов и степени их применения можно найти в обзорах [4–6] и цитируемой литературе.

Несмотря на то, что вопрос существования и получения таких импульсов сравнительно подробно проанализирован (см. обзоры [4–6] и главу в монографии [24]), когерентное распространение одноциклового и субциклового предельно коротких импульсов в резонансных средах недостаточно изучено. Большинство предыдущих исследований данного вопроса были выполнены в двухуровневом приближении [25–33]. Учет большего числа уровней может, однако, влиять на динамику импульсов в ряде случаев [34] и приводить к формированию слож-

\* E-mail: arhipovrostislav@gmail.com

ной картины фотонного эха [35, 36]. Тем не менее многие исследования показывают, что двухуровневая модель в ряде случаев способна адекватно описывать взаимодействие предельно короткого импульса с многоуровневыми средами [37, 38].

В работе [39] было найдено аналитическое решение уравнений Максвелла–Блоха в форме униполярного солитона самоиндуцированной прозрачности (СИП) в виде гиперболического секанса. Впоследствии данный солитон был обнаружен в численных расчетах, при когерентном распространении исходно биполярного импульса в двухуровневой поглощающей среде [27] и трехуровневой среде, состоящей из смеси поглощающих и усиливающих частиц [40]. Существование солитонов СИП было показано в многоуровневой среде в работе [41] при аналитическом решении уравнения синус-Гордона, см. также обзоры [42–45]. В ряде работ при анализе когерентного распространения униполярных импульсов в среде использовались приближенные аналитические модели [46–50], приводившие, однако, к физически некорректным результатам, так как используемые уравнения не удовлетворяли правилу сохранения электрической площади. Подробный анализ предела применимости этих приближений и их сопоставление с правилом сохранения площади приведены в обзоре [51].

В работах [52, 53] изучена динамика когерентного распространения униполярного полужиклового импульса в двухуровневой поглощающей среде. Показано, что динамика напряженности поля существенно зависит от начальной электрической площади импульса. Так, если начальная электрическая площадь импульса такова, что он ведет себя подобно  $4\pi$ -импульсу, то в процессе распространения такой импульс расщепляется на пару  $2\pi$ -подобных импульсов СИП — за время действия импульса среда возбуждается, затем возвращается в исходное состояние. Подобное поведение аналогично длинным импульсам, когда выполняется теорема площадей Мак Кола и Хана [54–57].

В данной работе на основании численного решения системы уравнений Максвелла–Блоха изучается динамика когерентного распространения полужиклового аттосекундного импульса в трехуровневой резонансно-поглощающей среде. Показано, что импульс, который для двухуровневой среды действует как  $4\pi$ -импульс, в случае трехуровневой среды ведет себя подобно  $6\pi$ -импульсу и расщепляется на три подимпульса. Каждый подимпульс ведет себя подобно  $2\pi$ -импульсу СИП для каждого резонансного перехода.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РАССМАТРИВАЕМАЯ СИСТЕМА

Анализ проводился на основе известной системы уравнений Максвелла–Блоха для трехуровневой среды, которая имеет вид [58]

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{21} = -\rho_{21}/T_{21} - i\omega_{12}\rho_{21} - i\frac{d_{12}E}{\hbar}(\rho_{22} - \rho_{11}) - i\frac{d_{13}E}{\hbar}\rho_{23} + i\frac{d_{23}E}{\hbar}\rho_{31}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{32} = -\rho_{32}/T_{32} - i\omega_{23}\rho_{32} - i\frac{d_{23}E}{\hbar}(\rho_{33} - \rho_{22}) - i\frac{d_{12}E}{\hbar}\rho_{31} + i\frac{d_{13}E}{\hbar}\rho_{21}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{31} = -\rho_{31}/T_{31} - i\omega_{13}\rho_{31} - i\frac{d_{13}E}{\hbar}(\rho_{33} - \rho_{11}) - i\frac{d_{12}E}{\hbar}\rho_{32} + i\frac{d_{23}E}{\hbar}\rho_{21}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{11} = (1 - \rho_{11})/T_{11} + i\frac{d_{12}E}{\hbar}(\rho_{21} - \rho_{21}^*) - i\frac{d_{13}E}{\hbar}(\rho_{13} - \rho_{13}^*), \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{22} = -\rho_{22}/T_{22} - i\frac{d_{12}E}{\hbar}(\rho_{21} - \rho_{21}^*) - i\frac{d_{23}E}{\hbar}(\rho_{23} - \rho_{23}^*), \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{33} = -\rho_{33}/T_{33} + i\frac{d_{13}E}{\hbar}(\rho_{13} - \rho_{13}^*) + i\frac{d_{23}E}{\hbar}(\rho_{23} - \rho_{23}^*), \quad (7)$$

$$P(z, t) = 2N_0d_{12} \operatorname{Re} \rho_{12} + 2N_0d_{13} \operatorname{Re} \rho_{13} + 2N_0d_{23} \operatorname{Re} \rho_{32}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 P(z, t)}{\partial t^2}. \quad (9)$$

В этой системе уравнений  $\rho_{11}$ ,  $\rho_{22}$ ,  $\rho_{33}$  — диагональные элементы матрицы плотности, имеющие смысл населенностей первого, второго и третьего уровней среды соответственно,  $\rho_{21}$ ,  $\rho_{32}$ ,  $\rho_{31}$  — недиагональные элементы матрицы плотности, определяющие динамику поляризации среды,  $\omega_{12}$ ,  $\omega_{23}$ ,  $\omega_{13}$  — частоты резонансных переходов,  $d_{12}$ ,  $d_{13}$ ,  $d_{23}$  — дипольные моменты этих переходов,  $P(z, t)$  — поляризация

Таблица. Параметры импульсов возбуждения и среды

Амплитуда импульса	$E_0 = 2.7 \cdot 10^5$ ESU
Длительность импульсов возбуждения	$\tau = 380$ ас
Частота перехода 1-2 (длина волны перехода)	$\omega_{12} = 2.69 \cdot 10^{15}$ рад/с ( $\lambda_{12} = \lambda_0 = 700$ нм)
Дипольный момент перехода 1-2	$d_{12} = 20$ Д
Частота перехода 1-3	$\omega_{13} = 1.5\omega_{12}$
Дипольный момент перехода 1-3	$d_{13} = 1.5d_{12}$
Частота перехода 2-3 в атоме водорода (длина волны перехода)	$\omega_{23} = \omega_{13} - \omega_{12}$
Дипольный момент перехода 2-3	$d_{23} = 0$
Концентрация атомов	$N_0 = 2 \cdot 10^{20}$ см <sup>-3</sup>
Времена релаксации	$T_{1k} = 100$ фс, $T_{2k} = 30$ фс

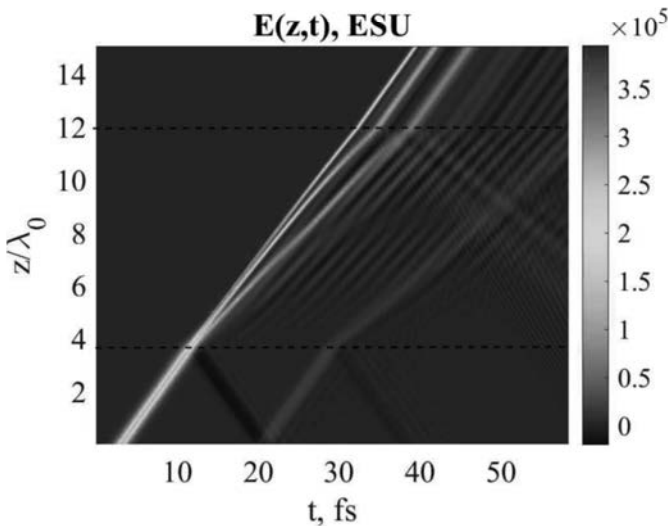


Рис. 1. Пространственно-временная динамика электрического поля  $E(z, t)$  в трехуровневой среде, границы которой обозначены штриховыми линиями. Среда располагалась в центре области интегрирования между точками  $z_1 = 4\lambda_0$  и  $z_2 = 12\lambda_0$

среды,  $E(z, t)$  — электрическое поле, динамика которого описывается волновым уравнением (9). Уравнения также содержат релаксационные члены  $T_{ik}$ .

В качестве начальных условий в среду слева направо из вакуума запускался импульс, имевший форму гиперболического секанса:

$$E(z = 0, t) = E_0 \operatorname{sech}\left(\frac{t - 6\tau}{\tau}\right). \quad (10)$$

Чтобы импульс вел себя подобно  $2\pi$ -импульсу СИП на основном переходе 1-2 (если среда двухуровневая), его амплитуда должна удовлетворять соотношению [39]

$$E_{02} = \hbar/(d_{12}\tau). \quad (11)$$

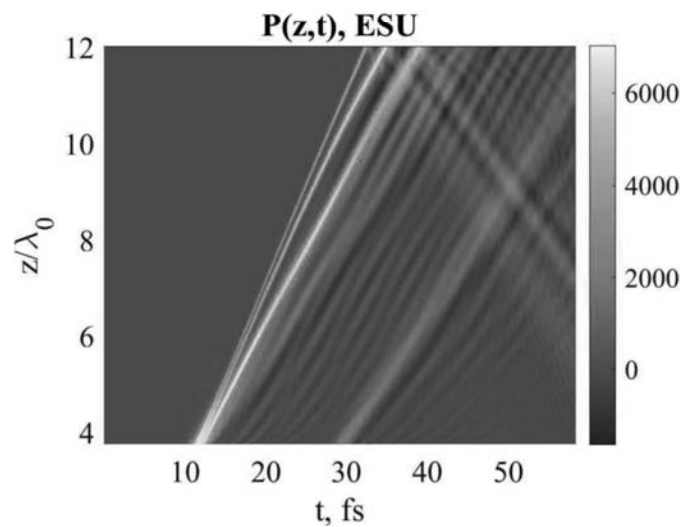


Рис. 2. Пространственно-временная динамика поляризации трехуровневой среды  $P(z, t)$ . Среда располагалась в центре области интегрирования между точками  $z_1 = 4\lambda_0$  и  $z_2 = 12\lambda_0$

Область интегрирования имела длину  $L = 15\lambda_0$ . Среда располагалась в центре области интегрирования между точками  $z_1 = 4\lambda_0$  и  $z_2 = 12\lambda_0$ . Проводилось численное решение системы уравнений (2)–(9) с начальным условием (10). Параметры среды и поля импульса указаны в таблице. Отметим, что в рассматриваемом примере трехуровневая среда имеет так называемую V-схему энергетических уровней, т.е. разрешенными в дипольном приближении являются резонансные переходы  $1 \rightarrow 2$  и  $1 \rightarrow 3$ , в то время как переход  $2 \rightarrow 3$  является дипольно-запрещенным. Значение амплитуды поля выбрано так, чтобы импульс действовал, как  $4\pi$ -импульс для перехода 1-2 двухуровневой среды,  $E_0 = 2E_{02}$ .

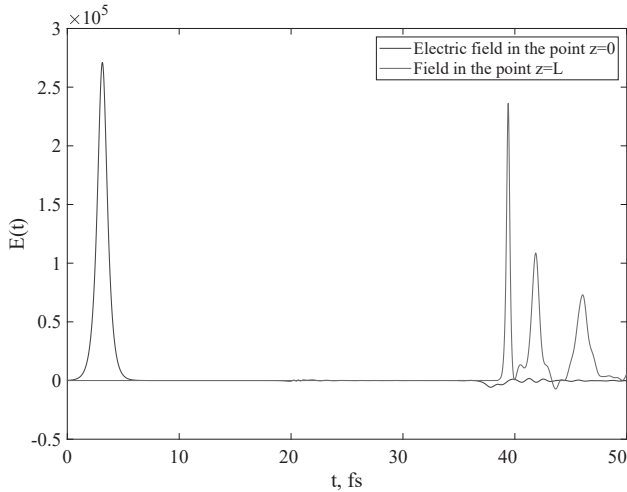


Рис. 3. Временная зависимость электрического поля  $E(t)$  в левой части области интегрирования  $z = 0$  (синяя кривая слева) и в правой части  $z = L$  (оранжевая линия справа)

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рисунки 1 и 2 иллюстрируют пространственно-временную динамику электрического поля импульса  $E(z, t)$  и поляризации трехуровневой среды  $P(z, t)$  соответственно. Границы среды обозначены штриховыми линиями на рис. 1. Видно, что исходный импульс расщепляется на три подимпульса, каждый из которых распространяется с разной скоростью, так что подимпульсы постепенно удаляются друг от друга. Таким образом, исходный импульс, который для двухуровневой среды действовал бы как  $4\pi$ -импульс, при добавлении третьего уровня начинает вести себя подобно  $6\pi$ -импульсу. После прохождения импульсов в среде остается волна поляризации, которая излучает вдогонку прошедшим импульсам в течение времени релаксации  $T_2$ , см. рис. 2.

Временная зависимость электрического поля в точках  $z = 0$  и  $z = L$  для случая рис. 1 приведена на рис. 3. Рисунок 4 иллюстрирует зависимость населенностей трех уровней среды от времени в начале и в конце среды. Видно, что напряженность поля на выходе из среды представляет собой три подимпульса. Также из рис. 4 видно, что населенности каждого из состояний возвращаются практически к исходному значению после каждого подимпульса, т. е. каждый подимпульс действует подобно  $2\pi$ -импульсу СИП.

Как показывают расчеты для случая на рис. 3, электрическая площадь (1) каждого из трех образо-

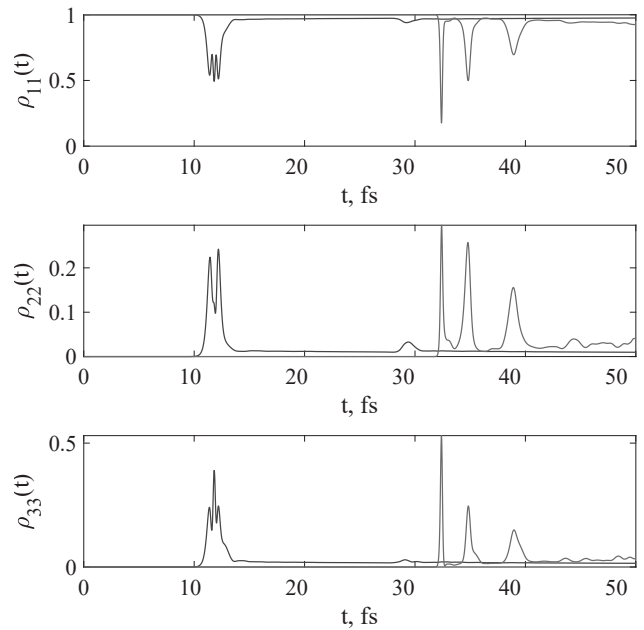
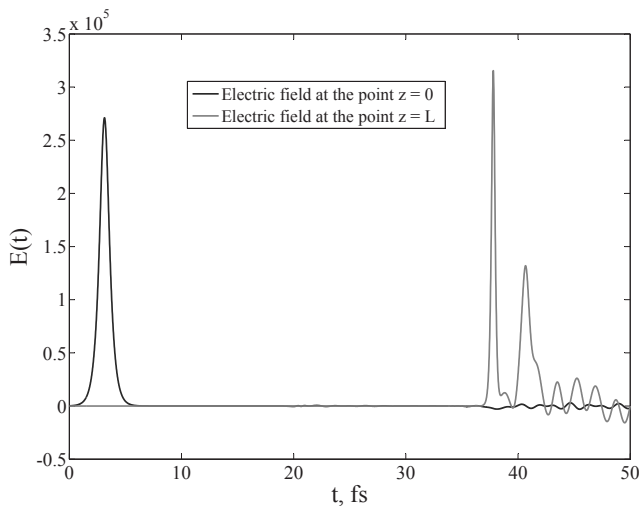


Рис. 4. Временные зависимости населенностей среды, синие линии — в начале среды (левые кривые), оранжевые линии — в конце среды (правые кривые)

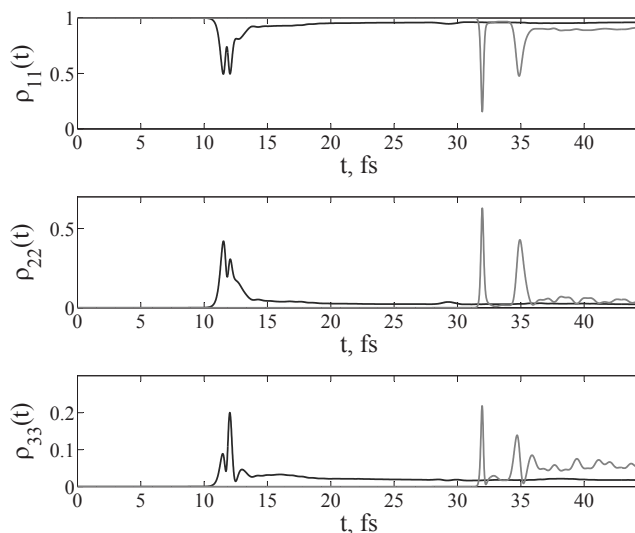
вавшихся подимпульсов, рассчитанная с безразмерным коэффициентом  $2d_{12}/\hbar$ , оказывается приблизительно одинаковой и равной  $\approx 1.3\pi$ . Таким образом, исходный  $4\pi$ -импульс распадается на подимпульсы таким образом, что, с учетом прочих остаточных осцилляций поля после трех основных подимпульсов на выходе из среды, обеспечивается точное выполнение правила сохранения электрической площади.

Интересно отметить, что похожая картина с расщеплением исходного импульса на подимпульсы и близкими значениями электрической площади каждого из них наблюдается и при других значениях электрической площади исходного падающего импульса. Так, например, если исходный импульс имеет площадь  $6\pi$  (вновь рассчитанную с безразмерным коэффициентом  $2d_{12}/\hbar$ ), то после прохождения слоя среды он расщепляется на пять полуциклового подимпульсов разной амплитуды и длительности, но с приблизительно одинаковой электрической площадью  $\approx 1.2\pi$ . Если же исходный импульс имеет площадь  $2\pi$ , то на выходе из среды образуется один подимпульс с электрической площадью  $\approx 1.3\pi$ , за которым следуют сильно выраженные медленно затухающие знакопеременные осцилляции поля, которые в то же время имеют суммарную электрическую площадь  $\approx 0.7\pi$ .

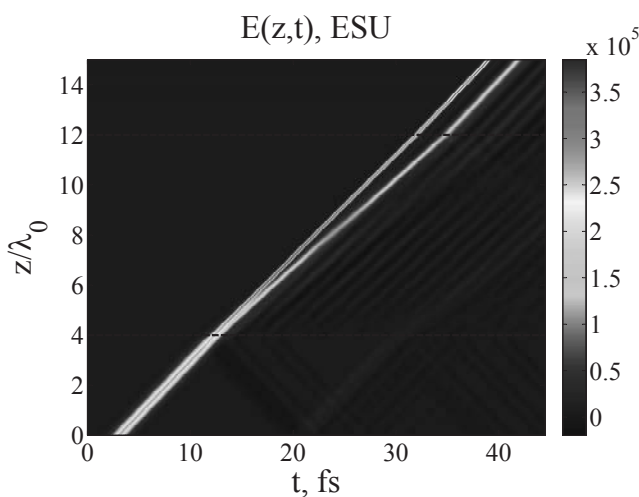
Описанная картина качественно сохраняется и при других значениях дипольных моментов разре-



**Рис. 5.** Временная зависимость электрического поля  $E(t)$  в левой части области интегрирования  $z = 0$  (синяя кривая слева) и в правой части  $z = L$  (оранжевая линия справа); параметры те же, что и в таблице, за исключением дипольного момента  $d_{13} = d_{12}/1.5$



**Рис. 7.** Временные зависимости населенностей среды, синие линии — в начале среды (левые кривые), оранжевые линии — в конце среды (правые кривые); параметры те же, что и в таблице, за исключением дипольного момента  $d_{13} = d_{12}/1.5$



**Рис. 6.** Пространственно-временная динамика электрического поля  $E(z, t)$  в трехуровневой среде, границы которой обозначены штриховыми линиями. Среда располагалась в центре области интегрирования между точками  $z_1 = 4\lambda_0$  и  $z_2 = 12\lambda_0$ ; параметры те же, что и в таблице, за исключением дипольного момента  $d_{13} = d_{12}/1.5$

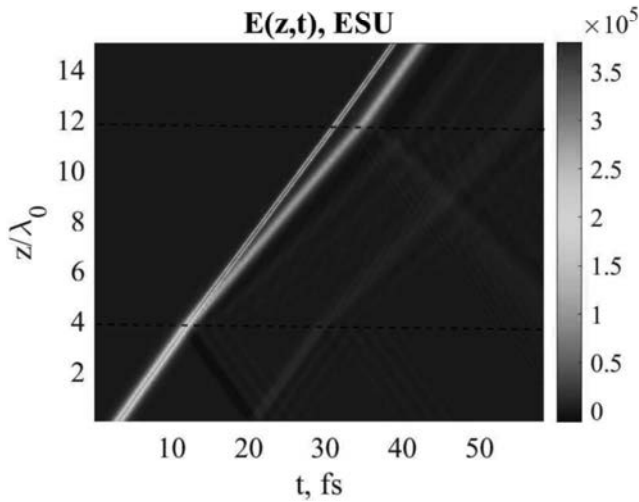
шенных переходов в трехуровневой среде. Например, для тех же значений параметров среды из таблицы, но при условии  $d_{12} = 1.5d_{13}$ , при численном моделировании наблюдалось расщепление исходного  $4\pi$ -импульса уже на два полужикловых подимпульса с разными амплитудой и длительностью, но примерно одинаковыми значениями электрической площади  $\approx 1.8\pi$  (остаточные затухающие ос-

циллиции поля, следующие после второго подимпульса, имели суммарную электрическую площадь  $\approx 0.4\pi$ ). Соответствующие пространственные и временные зависимости электрического поля и населенностей уровней среды показаны на рис. 5–7.

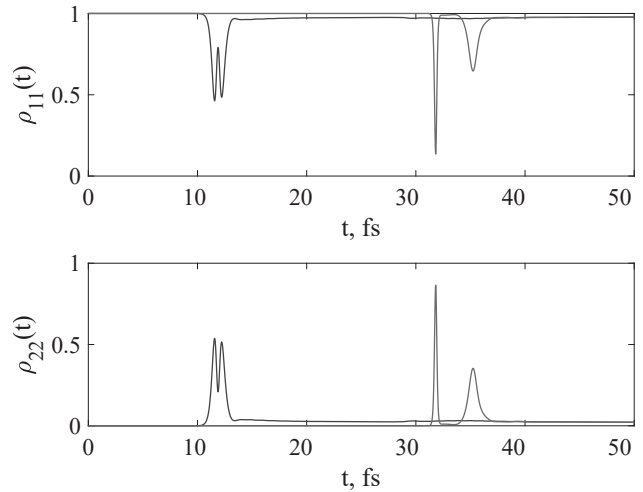
Нетрудно установить физическую причину наблюдаемого расщепления исходного полужиклового импульса. Оно аналогично расщеплению многоцикловых импульсов СИП в двухуровневой среде. При добавлении третьего уровня исходный импульс, который являлся  $4\pi$ -импульсом для основного перехода 1–2 двухуровневой среды, для перехода 1–3 начинает действовать подобно  $2\pi$ -импульсу. В итоге для «всей» среды импульс ведет себя подобно  $6\pi$ -импульсу. При распространении такого импульса в среде, как только разность населенностей для каждого перехода возвращается в основное состояние, происходит полное поглощение соответствующей части импульса, что ведет к его расщеплению. Подобный механизм приводит к расщеплению длинных многоцикловых импульсов СИП в двухуровневой среде [54–57].

#### 4. СРАВНЕНИЕ С ДИНАМИКОЙ В ДВУХУРОВНЕВОЙ СРЕДЕ

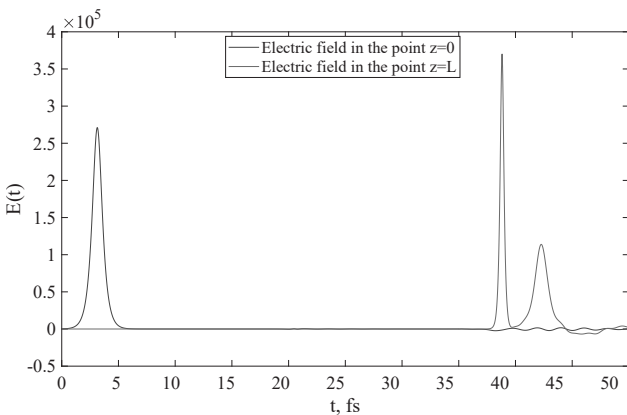
Для сравнения аналогичные зависимости электрического поля и населенности состояний, полученные в результате численного решения системы урав-



**Рис. 8.** Пространственно-временная динамика электрического поля  $E(z, t)$  в двухуровневой среде, границы которой обозначены штриховыми линиями. Среда располагалась в центре области интегрирования между точками  $z_1 = 4\lambda_0$  и  $z_2 = 12\lambda_0$



**Рис. 10.** Временные зависимости населенностей двухуровневой среды, синие линии слева — в начале среды, оранжевые линии справа — в конце среды



**Рис. 9.** Временная зависимость электрического поля  $E(t)$  в левой части области интегрирования  $z = 0$  (синяя кривая слева) и в правой части  $z = L$  (оранжевая линия справа)

нений Максвелла–Блоха для двухуровневой среды [58], приведены на рис. 8–10. В этом случае исходный импульс ведет себя, как  $4\pi$ -импульс, и расщепляется на пару  $2\pi$ -подобных импульсов СИП (см. рис. 8, 9). Остальные параметры такие же, как в таблице.

Таким образом, на основании представленных результатов численных расчетов можно сделать вывод, что добавление третьего уровня приводит к дополнительному расщеплению импульса. Однако сам эффект расщепления исходного импульса на подимпульсы, наблюдавшийся ранее в расчетах для двухуровневой среды [52, 53], сохраняется и в многоуровневой среде.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основании численного решения системы уравнений Максвелла–Блоха для трехуровневой среды изучена динамика когерентного распространения полуциклового аттосекундного импульса. Амплитуда и длительность исходного импульса подобраны таким образом, чтобы импульс действовал подобно  $4\pi$ -импульсу для основного перехода 1–2 двухуровневой среды. Показано, что в трехуровневой среде импульс ведет себя подобно  $6\pi$ -импульсу и расщепляется на три  $2\pi$ -подобных импульсов СИП, каждый из которых распространяется с разной скоростью в среде. Таким образом, расщепление полуциклового импульса, исходно обнаруженное в двухуровневой среде, сохраняется и в трехуровневой среде, однако имеет более сложную динамику — вместо расщепления на пару подимпульсов, возникает три подимпульса. Приведенные результаты позволяют прояснить динамику когерентного распространения униполярных предельно коротких импульсов в многоуровневых резонансных средах, которая еще недостаточно изучена на сегодняшний день. Исследованный эффект может применяться для компрессии полуциклового импульсов.

**Финансирование.** Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научных проектов 21-72-10028 (динамика импульса в трехуровневой среде) и 23-12-00012 (динамика импульса в двухуровневой среде).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Джексона, *Классическая электродинамика*, Мир, Москва (1965) [J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley, Hoboken, New York (1997)].
2. Е. Г. Бессонов, ЖЭТФ **80**, 852 (1981) [E. G. Besonov, Sov. Phys. JETP **53**, 433 (1981)].
3. Н. Н. Розанов, Опт. и спектр. **107**, 761 (2009) [N. N. Rosanov, Opt. Spectr. **107**, 721 (2009)].
4. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, КЭ **50**, 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, Quant. Electron. **50**, 801 (2020)].
5. Н. Н. Розанов, УФН **193**, 1127 (2023) [N. N. Rosanov, Phys. Usp. **66**, 1059 (2023)].
6. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, УФН **188**, 1347 (2018) [N. N. Romanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, Phys. Usp. **61**, 1227 (2018)].
7. W. Pauli, *Handbuch der Physik*, Springer (1933).
8. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **9**, 1163 (1939).
9. L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1968).
10. А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин, УФН **125**, 377 (1978) [A. M. Dykhne and G. L. Yudin, Sov. Phys. Usp. **21**, 549 (1978)].
11. D. Dimitrovski, E. A. Solov'ev, and J. S. Briggs, Phys. Rev. A **72**, 043411 (2005).
12. A. S. Moskalenko, Z.-G. Zhu, and J. Berakdar, Phys. Rep. **672**, 1 (2017).
13. N. Rosanov, D. Tumakov, M. Arkhipov, and R. Arkhipov, Phys. Rev. A **104**, 063101 (2021).
14. A. Pakhomov, N. Rosanov, M. Arkhipov, and R. Arkhipov, JOSA B **41**, 46 (2024).
15. В. Л. Гинзбург, С. И. Сыроватский, УФН **87**, 65 (1965) [V. L. Ginzburg and S. I. Syrovatskii, Sov. Phys. Usp. **8**, 674 (1966)].
16. М. Т. Hassan, Т. Т. Luu, А. Moulet, О. Raskazovskaya, Р. Zhokhov, М. Garg, N. Karpowicz, А. М. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, Nature **530**, 66 (2016).
17. H.-C. Wu and J. Meyer-ter Vehn, Nature Photon. **6**, 304 (2012).
18. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, Sci. Rep. **8**, 2669 (2018).
19. I. E. Ilyakov, B. V. Shishkin, E. S. Efimenko, S. B. Bodrov, and M. I. Bakunov, Opt. Express **30**, 14978 (2022).
20. S. Wei, Y. Wang, X. Yan, and B. Eliasson, Phys. Rev. E **106**, 025203 (2022).
21. Q. Xin, Y. Wang, X. Yan, and B. Eliasson, Phys. Rev. E **107**, 035201 (2023).
22. A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, and A. M. Popov, Phys. Rev. E **104**, 025202 (2021).
23. M. Arkhipov, A. Pakhomov, R. Arkhipov, and N. Rosanov, Opt. Lett. **47**, 4637 (2023).
24. Н. Н. Розанов, М. В. Архипов, Р. М. Архипов, А. В. Пахомов, *Коллективная монография «Терагерцовая фотоника»*, под ред. В. Я. Панченко, А. П. Шкуринова, Российская академия наук, Москва (2023), с. 360.
25. X. Song, W. Yang, Z. Zeng, R. Li, and Z. Xu, Phys. Rev. A **82**, 053821 (2010).
26. S. Hughes, Phys. Rev. Lett. **81**, 3363 (1998).
27. V. P. Kalosha and J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **83**, 544 (1999).
28. A. V. Tarasishin, S. A. Magnitskii, V. A. Shuvaev, and A. M. Zheltikov, Opt. Express **8**, 452 (2001).
29. V. P. Kalosha and J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **83**, 544 (1999).
30. D. V. Novitsky, Phys. Rev. A **84**, 013817 (2011).
31. D. V. Novitsky, Phys. Rev. A **85**, 043813 (2012).
32. D. V. Novitsky, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **47**, 095401 (2014).
33. D. V. Novitsky, Opt. Commun. **358**, 202 (2016).
34. J. Cheng and J. Zhou, Phys. Rev. A **67**, 041404 (2003).
35. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **67**, 887 (1998) [A. Y. Parkhomenko and S. V. Sazonov, JETP Lett. **67**, 934 (1998)].
36. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, ЖЭТФ **123**, 919 (2003) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, JETP **96**, 807 (2003)].
37. O. D. Mucke, T. Tritschler, M. Wegener, and U. Morgner, Phys. Rev. Lett. **87**, 057401 (2001).
38. A. Pakhomov, N. Rosanov, M. Arkhipov, and R. Arkhipov, JOSA B **41**, 46 (2024).
39. R. K. Bullough and F. Ahmad, Phys. Rev. Lett. **27**, 330 (1971).

40. Н. В. Высотина, Н. Н. Розанов, В. Е. Семенов, Письма в ЖЭТФ **83**, 337 (2006) [N. V. Vysotina, N. N. Rozanov, and V. E. Semenov, JETP Lett. **83**, 279 (2006)].
41. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **114**, 1595 (1998) [A. Y. Parkhomenko and S. V. Sazonov, JETP **87**, 864 (1998)].
42. А. И. Маймистов, КЭ **30**, 287 (2000) [A. I. Maimistov, Quant. Electron. **30**, 287 (2000)].
43. А. И. Маймистов, КЭ **40**, 756 (2010) [A. I. Maimistov, Quant. Electron. **40**, 756 (2010)].
44. D. U. Mihalache, Roman. Rep. Phys. **69**, 403 (2017).
45. С. В. Сазонов, Опт. и спектр. **130**, 1846 (2022) [S. V. Sazonov, Opt. Spectr. **130**, 1573 (2022)].
46. Э. М. Беленов, П. Г. Крюков, А. В. Назаркин, А. Н. Ораевский, А. В. Усков, Письма в ЖЭТФ **47**, 442 (1988) [E. M. Belenov, P. G. Kryukov, A. V. Nazarkin, A. N. Oraevskii, and A. V. Uskov, JETP Lett. **47**, 523 (1988)].
47. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, Письма в ЖЭТФ **51**, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, JETP Lett. **51**, 288 (1990)].
48. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, В. А. Ущачовский, ЖЭТФ **100**, 762 (1991) [E. Belenov, A. Nazarkin, and V. Ushcharovskii, Sov. Phys. JETP **73**, 422 (1991)].
49. А. В. Богацкая, А. М. Попов, Письма в ЖЭТФ **188**, 291 (2023) [A. V. Bogatskaya and A. M. Popov, JETP Lett. **118**, 296 (2023)].
50. A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, and A. M. Popov, Laser Phys. Lett. **21**, 015401 (2024).
51. А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, М. В. Архипов, Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **119**, 100 (2024) [A. V. Pakhomov, N. N. Rosanov, M. V. Arkhipov, and R. M. Arkhipov, JETP Lett. **119** (2024)].
52. Р. М. Архипов, Н. Н. Розанов, Опт. и спектр. **124**, 691 (2018) [R. M. Arkhipov and N. N. Rosanov, Opt. Spectr. **124**, 726 (2018)].
53. R. Arkhipov, M. Arkhipov, I. Babushkin, A. Pakhomov, and N. Rosanov, JOSA B **38**, 2004 (2021).
54. S. L. McCall and E. L. Hahn, Phys. Rev. **183**, 457 (1969).
55. П. Г. Крюков, В. С. Летохов, УФН **99**, 169 (1969) [P. G. Kryukov and V. S. Letokhov, Sov. Phys. Usp. **12**, 641 (1970)].
56. И. А. Полуэктов, Ю. М. Попов, В. С. Ройтберг, УФН **114**, 97 (1974) [I. A. Poluektov, Yu. M. Popov, and V. S. Roitberg, Sov. Phys. Usp. **18**, 673 (1975)].
57. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, Москва (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Wiley, New York (1975)].
58. А. Ярив, *Квантовая электроника*, Сов. радио, Москва (1980) [A. Yariv, *Quantum Electronics*, Wiley, New York (1975)].



# VACUUM BIREFRINGENCE AND DICHROISM IN A STRONG PLANE-WAVE BACKGROUND

*I. A. Aleksandrov*<sup>a,b\*</sup>, *V. M. Shabaev*<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup> *Saint Petersburg State University, Department of Physics  
199034, Saint Petersburg, Russia*

<sup>b</sup> *Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences  
194021, Saint Petersburg, Russia*

<sup>c</sup> *National Research Centre «Kurchatov Institute», B. P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute  
188300, Gatchina, Leningrad district, Russia*

Received March 16, 2024,  
revised version March 16, 2024,  
Accepted for publication April 4, 2024

In the present study, we consider the effects of vacuum birefringence and dichroism in strong electromagnetic fields. According to quantum electrodynamics, the vacuum state exhibits different refractive properties depending on the probe photon polarization and one also obtains different probabilities of the photon decay via production of electron-positron pairs. Here we investigate these two phenomena by means of several different approaches to computing the polarization operator. The external field is assumed to be a linearly polarized plane electromagnetic wave of arbitrary amplitude and frequency. Varying the probe-photon energy and the field parameters, we thoroughly examine the validity of the locally-constant field approximation (LCFA) and techniques involving perturbative expansions in terms of the external-field amplitude. Within the latter approach, we develop a numerical method based on a direct evaluation of the weak-field Feynman diagrams, which can be employed for investigating more complex external backgrounds. The polarization operator depends on two parameters: classical nonlinearity parameter  $\xi$  and the product  $\eta = \omega q_0/m^2$  of the laser field frequency  $\omega$  and the photon energy  $q_0$  ( $m$  is the electron mass). The domains of validity of the approximate techniques in the  $\xi\eta$  plane are explicitly identified.

DOI: 10.31857/S0044451024080042

## 1. INTRODUCTION

According to quantum electrodynamics (QED), the physical vacuum state contains quantum fluctuations of the electromagnetic and electron-positron fields, which can be viewed as spontaneous creation and annihilation of electron-positron pairs interacting with each other via virtual photons. Although these virtual particles are not observable themselves, their existence can manifest itself while interacting with external fields and real particles giving rise to a number of remarkable nonlinear phenomena such as light-by-light scattering [1–4], Sauter-Schwinger effect [2, 5, 6], and so on (for review, see, e. g., Refs. [7–9]). In this investigation, we consider propagation of a probe photon in vacuum in the pres-

ence of a strong external background. The latter polarizes the physical vacuum, so the probe photon effectively interacts with a nonlinear medium, which leads to the phenomena of vacuum birefringence and dichroism [10–14] which are in the focus of the present study (we note that the nontrivial properties of the vacuum state in the presence of real photons give also rise to recently discussed stimulated photon emission [15]).

Observing these processes in the laboratory represents currently an intriguing and challenging task. There are mainly two different approaches to probing vacuum birefringence. First, one can rely on unprecedented accuracy of experimental measurements in the optical domain, i. e., in the regime of relatively low probe-photon energies (see, e. g., Refs. [16–22]). From the theoretical viewpoint, this domain allows one to employ local approximations, i. e., to treat the external (laser) field as a locally constant background. The corresponding locally-constant field approximation

\* E-mail: i.aleksandrov@spbu.ru

(LCFA) has basically two different implementations based either on employing the exact expressions for the Heisenberg–Euler effective Lagrangian [23] or on using the local values of the polarization operator derived in constant crossed fields [24,25]. The second approach to vacuum birefringence involves high-energy probe photons [25–27]. The advantage of this technique appears due to large probabilities of the corresponding quantum processes resulting in large values of the experimental signal. On the other hand, it is significantly more difficult to perform measurements in the high-energy domain. To properly assess the feasibility of the corresponding scenarios, one has to obtain accurate and reliable theoretical predictions.

In order to avoid approximate local treatment of the external electromagnetic field, one can model it with a plane-wave background allowing one to deduce explicit analytical expressions for the polarization tensor [13,14,24]. On the other hand, this simplified setup may not properly reflect the properties of real experimental conditions.

In the present study, we have two primary aims. First, we will thoroughly examine the plane-wave scenario by means of analytical nonperturbative expressions derived in Refs. [13,14,24]. We will compute the polarization tensor in a wide range of physical parameters governing the process under consideration: laser-field amplitude, laser frequency, and probe-photon energy. Expanding the nonperturbative result in powers of the external-field amplitude, we will assess the accuracy of the calculations based on perturbation theory (PT). Besides, we will quantitatively analyze the validity of the LCFA in the two forms described above. Second, the polarization tensor will be directly evaluated via the corresponding Feynman diagrams. This approach is very important since it can allow one to consider other field configurations, which differ from a simple plane-wave scenario. In what follows, we will benchmark our direct computational procedures and also provide an additional insight into the analytical properties of the integrands involved in the Feynman diagrams. For instance, it will be demonstrated that the overlap between the branch cuts that appears for sufficiently high photon energies is closely related to the decay of the probe photon via production of electron-positron pairs. We also mention that  $e^+e^-$  pairs can be produced directly by a classical strong field, i. e., via the Sauter-Schwinger mechanism. The validity of the LCFA in this context was recently examined in Refs. [28–31].

The paper has the following structure. In Sec. 2 we describe the setup under consideration involving a

probe photon and external plane-wave background. In Sec. 3 we present nonperturbative expressions which we employ in our numerical computations. In Sec. 4 we calculate the leading-order contribution with respect to the external-field amplitude. Section 5 is devoted to the description of the two possible implementations of the LCFA. In Sec. 6 we discuss how one can directly evaluate the leading-order Feynman diagrams. Section 7 contains our numerical results obtained by means of the various techniques. Finally, we conclude in Sec. 8.

Throughout the text, we employ the units  $\hbar = c = 1$ ,  $\alpha = e^2/(4\pi) \approx 1/137$ .

## 2. SETUP AND NOTATION

We assume that the external plane wave is polarized along the  $x$  axis and propagates in the  $z$  direction, i. e., it depends on  $\varphi = \omega n^\mu x_\mu = \omega(t - z)$ , where  $\omega$  is the laser frequency. The null vector  $n$  obeys  $n_0 = 1$ ,  $n^2 = 0$ . The corresponding vector potential has the following form:

$$\mathbf{A}(x) = \mathcal{A}(\omega(t - z))\mathbf{e}_x, \quad (1)$$

$$\mathcal{A}(\varphi) = \frac{E_0}{\omega} \sin \varphi, \quad (2)$$

where  $E_0$  is the field strength amplitude. We also introduce a dimensionless parameter  $\xi = |eE_0|/(m\omega)$ . The initial photon momentum  $\mathbf{q}$  points in the opposite direction to  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$ ,  $\mathbf{q} = -q_0\mathbf{e}_z$ . Accordingly, the initial 4-momentum of the photon is  $q^\mu = q_0(1, 0, 0, -1)^t$ . The final momentum will be denoted by  $k^\mu$ . In what follows, we will also employ the light-cone components which for arbitrary 4-vector  $v^\mu$  read

$$v_+ = \frac{v_0 + \mathbf{nv}}{2}, \quad (3)$$

$$v_- = v_0 - \mathbf{nv}, \quad (4)$$

$$\mathbf{v}_\perp = \mathbf{v} - (\mathbf{nv})\mathbf{n}. \quad (5)$$

The scalar product of two vectors can be evaluated via

$$vw \equiv v^\mu w_\mu = v_+w_- + v_-w_+ - \mathbf{v}_\perp\mathbf{w}_\perp. \quad (6)$$

For instance,  $n_+ = 1$ ,  $n_- = 0$ ,  $\mathbf{n}_\perp = 0$ , and  $\varphi = \omega x_-$ .

The amplitude  $\mathcal{S}(q, k)$  of the process described by the diagram in Fig. 1 involves two photon wavefunctions defined as

$$f_q^\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2q_0}} e^{-iqx} \varepsilon^\mu(q), \quad (7)$$

where  $\varepsilon^\mu(q)$  is the polarization 4-vector. The amplitude can be represented in the form

$$\mathcal{S}(q, k) = \frac{1}{\sqrt{4q_0k_0}} \varepsilon_\mu(q) i [\Pi_0^{\mu\nu}(q, k) + \Pi^{\mu\nu}(q, k)] \varepsilon_\nu^*(k). \quad (8)$$



**Fig. 1.** Feynman diagram describing the leading-order contribution to the photon polarization operator. The amplitude of the process is proportional to the fine-structure constant  $\alpha$  and exactly takes into account the interaction with the classical external background (double lines represent the dressed Green's functions)

Here  $\Pi_0^{\mu\nu}(q, k)$  denotes the zero-field contribution to the polarization operator, which corresponds to the diagram with the free-electron Green's functions describing vacuum polarization in the absence of external fields. This contribution diverges and requires a usual renormalization procedure. Since this term does not affect the processes of vacuum birefringence and dichroism, our task is to compute the field-dependent part  $\Pi^{\mu\nu}(q, k)$ , which is finite.

In what follows, we will evaluate  $\Pi^{\mu\nu}(q, k)$  by means of several different techniques mentioned above. As will be seen below, the polarization operator involving  $\xi$ ,  $\omega$ , and  $q_0$  depends, in fact, only on  $\xi$  and the product  $\omega q_0$ . We will consider  $\xi$  and  $\eta \equiv \omega q_0/m^2$  as two independent dimensionless parameters governing the processes of vacuum birefringence and dichroism. We will also introduce the so-called quantum nonlinearity parameter  $\chi = 2\xi\eta$  which will be considered as a derived quantity  $\chi(\xi, \eta)$ .

### 3. NONPERTURBATIVE ANALYTICAL FORMULAS

In the case of a plane-wave external background, it is possible to compute the polarization tensor analytically. In Ref. [13] it was done by means of the operator approach. In Ref. [14] the calculations were performed in the case of a monochromatic plane wave. Recently, in Ref. [24] the results of Refs. [13,14] were confirmed by direct computations of the Feynman diagram in Fig. 1 with the aid of the exact Green's functions, which can be constructed from the Volkov solutions.

Here we will first employ the general expressions presented in Refs. [13,14,24]. Due to the symmetry of the external plane-wave field, it can only change the  $q_+$  component of the photon momentum, so the amplitude corresponding to the Feynman diagram in Fig. 1 contains  $\delta(k_- - q_-)\delta(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{q}_\perp)$ . It turns out that the cumbersome expressions for the amplitude derived in Refs. [13,14,24] become relatively simple in the par-

ticular case of a circularly polarized plane-wave background. Due to the helicity conservation, the momentum component  $q_+$  can change only by  $\pm 2\omega$  or remain the same (see also Ref. [32]). It is not the case if the external field has a linear polarization since such a plane wave does not possess a well-defined helicity quantum number. Accordingly, the  $q_+$  momentum component of the photon may change by an arbitrary integer number of  $\omega$ . The general expression for the setup described above has the following form:

$$\Pi^{\mu\nu}(q, k) = -\frac{4\pi^2\alpha}{\omega}\delta(k_- - q_-)\delta(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{q}_\perp) \times \int_{-1}^1 dv \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \int_{-\infty}^\infty d\varphi e^{i\Phi} \times \begin{pmatrix} c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b + \Delta b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix}, \quad (9)$$

where

$$b = \left(\frac{i}{\tau} + \frac{1}{2}kq\right)(1 - e^{i\tau\beta}) + \frac{2m^2\tau\xi^2}{\mu} e^{i\tau\beta} \sin^2(\mu\omega q_0) \cos^2\varphi, \quad (10)$$

$$\Delta b = 2m^2\xi^2 \left[ \text{sinc}^2(\mu\omega q_0) \sin^2\varphi - 2 \text{sinc}(2\mu\omega q_0) \sin^2\varphi - \sin^2(\mu\omega q_0) + \sin^2\varphi \right] e^{i\tau\beta}, \quad (11)$$

$$c = \frac{k_0 q_0 \mu}{\tau} (1 - e^{i\tau\beta}), \quad (12)$$

$$\mu = \frac{1}{2}\tau(1 - v^2), \quad (13)$$

$$\Phi = \frac{k_+ - q_+}{\omega}\varphi + \frac{1}{2}\mu kq - m^2\tau, \quad (14)$$

$$\beta = m^2\xi^2 \left[ \text{sinc}^2(\mu\omega q_0) \sin^2\varphi - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{sinc}(2\mu\omega q_0) \cos 2\varphi \right]. \quad (15)$$

In what follows, we will be interested only in the elastic process, where  $k_+ = q_+$  as the other channels are significantly suppressed (actually, they rather represent reactions involving photon merging or splitting than the phenomenon of birefringence). To extract the particular process of elastic scattering, one has to isolate the zeroth-order Fourier harmonics with respect to  $\varphi$  dependence in the functions  $b$ ,  $\Delta b$ , and  $c$ , so the integration of  $\exp(i\Phi)$  yields the necessary delta-function.

This can be straightforwardly attained with the aid of the Jacobi-Anger identity. The result reads

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{elastic}}^{\mu\nu}(q, k) = & -(2\pi)^3 \alpha \delta(k - q) \times \\ & \times \int_{-1}^1 dv \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} e^{-im^2\tau} \times \\ & \times \begin{pmatrix} \tilde{c} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{b} + \Delta\tilde{b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{c} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (16)$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{b} = & \frac{i}{\tau} [1 - \Xi J_0(A)] + \\ & + \frac{m^2 \tau \xi^2}{\mu} \sin^2(\mu\omega q_0) \Xi [J_0(A) + iJ_1(A)], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{b} = & m^2 \xi^2 \Xi \{ -2 \sin^2(\mu\omega q_0) J_0(A) + \\ & + [\text{sinc}^2(\mu\omega q_0) - 2 \text{sinc}(2\mu\omega q_0) + 1] \times \\ & \times [J_0(A) - iJ_1(A)] \}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\tilde{c} = \frac{q_0^2 \mu}{\tau} [1 - \Xi J_0(A)], \quad (19)$$

$$\Xi = \exp \left\{ \frac{i}{2} m^2 \tau \xi^2 [\text{sinc}^2(\mu\omega q_0) - 1] \right\}, \quad (20)$$

$$A = \frac{1}{2} m^2 \tau \xi^2 [\text{sinc}(2\mu\omega q_0) - \text{sinc}^2(\mu\omega q_0)]. \quad (21)$$

Here  $J_n$  are the Bessel functions of the first kind. We will assume hereinafter  $k^\mu = q^\mu$ . We also note that the elements  $\Pi^{00}$  and  $\Pi^{33}$  are equal, which preserves the gauge invariance and the Ward-Takahashi identity [33]. These components will not be evaluated in our study as they do not affect the phenomena under consideration.

The birefringent and dichroic properties of the vacuum in the presence of strong fields manifest themselves in the difference between  $\Pi^{11}$  and  $\Pi^{22}$  elements: photon polarizations along the  $x$  and  $y$  axes correspond to different refractive and absorption indexes. In what follows, we will compute these elements. As was stated above, these quantities involve the three parameters  $\xi$ ,  $\omega$ , and  $q_0$ , but they depend, in fact, on  $\xi$  and  $\eta = \omega q_0/m^2$  as becomes evident from Eqs. (16)–(21) (see also Ref. [32]).

#### 4. PERTURBATION THEORY

Here we will consider the leading-order term of Eq. (16) with respect to the small- $\xi$  expansion. This

contribution is proportional to  $\xi^2$  and corresponds to the three Feynman diagrams displayed in Fig. 2. Expanding the function  $\Xi$  and the Bessel functions in Taylor series, one obtains

$$\tilde{b}_{\text{LO}} = m^2 \xi^2 \left\{ \frac{1}{2} [\text{sinc}^2(\mu\omega q_0) - 1] + \frac{\tau}{\mu} \sin^2(\mu\omega q_0) \right\}, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{b}_{\text{LO}} = & m^2 \xi^2 [-2 \sin^2(\mu\omega q_0) + \text{sinc}^2(\mu\omega q_0) - \\ & - 2 \text{sinc}(2\mu\omega q_0) + 1], \end{aligned} \quad (23)$$

$$\tilde{c}_{\text{LO}} = -\frac{i}{2} q_0^2 \mu m^2 \xi^2 [\text{sinc}^2(\mu\omega q_0) - 1]. \quad (24)$$

Here «LO» stands for «low order». It turns out that one can replace  $\mu$  with Eq. (13) and perform the  $\tau$  integration analytically. Let us first introduce the following general representation:

$$\Pi_{\text{elastic}}^{\mu\nu}(q, k) = -(2\pi)^3 \alpha \delta(k - q) m^2 \xi^2 M^{\mu\nu}. \quad (25)$$

Within PT we find

$$M_{\text{LO}}^{11} = \int_{-1}^1 dv \left[ \frac{2v^2}{1-v^2} I_1(v) + \frac{1}{2} I_2(v) + I_3(v) \right], \quad (26)$$

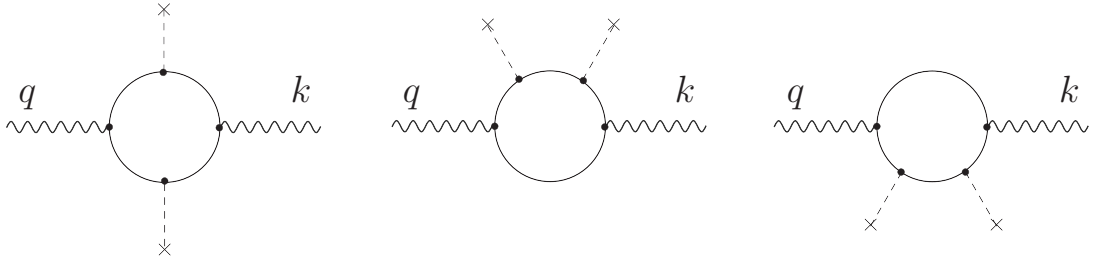
$$M_{\text{LO}}^{22} = \int_{-1}^1 dv \left[ \frac{2}{1-v^2} I_1(v) + \frac{1}{2} I_2(v) \right], \quad (27)$$

where

$$\begin{aligned} I_1(v) = & \int_0^\infty \frac{dt}{t} \sin^2(\gamma t) e^{-it} = \\ = & \frac{1}{4} \ln |1 - 4\gamma^2| - \frac{i\pi}{4} \theta \left( \gamma - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} I_2(v) = & \int_0^\infty \frac{dt}{t} [\text{sinc}^2(\gamma t) - 1] e^{-it} = \\ = & \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{4\gamma^2} \right) \ln |1 - 4\gamma^2| - \\ & - \frac{1}{2\gamma} \ln \left| \frac{1 + 2\gamma}{1 - 2\gamma} \right| + \\ & + \frac{i\pi}{2} \left( 1 - \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{4\gamma^2} \right) \theta \left( \gamma - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} I_3(v) = & \int_0^\infty \frac{dt}{t} [1 + \text{sinc}^2(\gamma t) - 2 \text{sinc}(2\gamma t)] e^{-it} = \\ = & -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{4\gamma^2} \right) \times \\ & \times \left[ \ln |1 - 4\gamma^2| - i\pi \theta \left( \gamma - \frac{1}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (30)$$



**Fig. 2.** Feynman diagrams corresponding to the leading-order contribution within the PT expansion in terms of the external field (the amplitudes are proportional to  $\xi^2$ ). The interaction with the classical external field is denoted by the cross. Depending on the energy-momentum transfer at the cross vertices, the process is either elastic (2-to-2 process) or corresponds to  $k \neq q$

$$\gamma = \gamma(v) = \frac{\omega q_0}{2m^2}(1 - v^2) = \frac{1}{2}\eta(1 - v^2). \quad (31)$$

The expressions (26) and (27) depend only on  $\eta = \omega q_0/m^2$ , while the nonperturbative values of  $M^{\mu\nu}$  [see Eq. (25)] also involve  $\xi$ . Below we will compare the leading-order terms with the nonperturbative results. Let us now present the low- and high-energy asymptotic expressions for  $M_{LO}^{11}$  and  $M_{LO}^{22}$ . In the low-energy case,  $\epsilon \equiv 2\eta = 2\omega q_0/m^2 \ll 1$ ,

$$M_{LO}^{11} = -\frac{4}{45}\epsilon^2 - \frac{17}{3150}\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^6), \quad (32)$$

$$M_{LO}^{22} = -\frac{7}{45}\epsilon^2 - \frac{131}{9450}\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^6). \quad (33)$$

In the high-energy limit,  $\epsilon \equiv 1/(2\eta) = m^2/(2\omega q_0) \ll 1$ , we obtain

$$\begin{aligned} M_{LO}^{11} = & \frac{1}{2} \ln^2 \epsilon + \left(1 - \ln 2 + \frac{i\pi}{2}\right) \ln \epsilon + \\ & + \left[ \frac{5}{2} - \ln 2 + \frac{1}{2} \ln^2 2 - \frac{\pi^2}{4} + \frac{i\pi}{2}(1 - \ln 2) \right] \\ & + i\pi \epsilon \ln \epsilon + \left[ -\frac{\pi^2}{2} + \frac{i\pi}{2}(3 - 2 \ln 2) \right] \epsilon + \\ & + \mathcal{O}(\epsilon^2 \ln^2 \epsilon), \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} M_{LO}^{22} = & \frac{1}{2} \ln^2 \epsilon + \left(1 - \ln 2 + \frac{i\pi}{2}\right) \ln \epsilon + \\ & + \left[ \frac{7}{2} - \ln 2 + \frac{1}{2} \ln^2 2 - \frac{\pi^2}{4} + \frac{i\pi}{2}(1 - \ln 2) \right] \\ & + i\pi \epsilon \ln \epsilon + \left[ -\frac{\pi^2}{2} + \frac{i\pi}{2}(1 - 2 \ln 2) \right] \epsilon + \\ & + \mathcal{O}(\epsilon^2 \ln^2 \epsilon), \end{aligned} \quad (35)$$

While the low-energy result (32), (33) is real, the expressions (34) and (35) possess imaginary parts, which describe the process of photon decay. The imaginary part of the difference  $\delta M_{LO} \equiv M_{LO}^{11} - M_{LO}^{22} \approx -1 + i\pi\epsilon$

governs the dichroic properties of the vacuum and appears once  $\eta > 1$ . In Sec. 6 we will discuss how the imaginary part appears in a direct evaluation of the Feynman diagrams in Fig. 2.

### 5. LOCALLY-CONSTANT FIELD APPROXIMATION

Here we will employ relatively simple closed-form expressions treating the external background as locally constant. There are basically two different approaches. The first one is based on calculating the polarization tensor in constant crossed fields and then using the actual spatiotemporal dependence of the plane-wave field (1) when integrating over  $\varphi$ . The second method employs the Heisenberg–Euler effective Lagrangian computed in a constant electromagnetic field and takes into account the leading-order quantum correction with respect to the field amplitude  $E_0$ . The first approach is generally more accurate as it incorporates the higher-order terms in  $E_0$  and involves the expression for the polarization operator which is derived for arbitrary photon energies  $q_0$ . The second technique based on the Heisenberg–Euler Lagrangian is only valid for sufficiently low photon energies, when there is only a small momentum transfer into the  $e^+e^-$  loop in the diagram in Fig. 1. Besides, the applicability of this method is limited since it involves the PT expansion with respect to the field amplitude. In what follows, we will describe the both approaches and then thoroughly analyze their validity.

#### 5.1. Polarization operator in constant crossed fields

In the setup under consideration, the vector potential (1) is assumed to be a monochromatic plane wave (2). If one replaces  $\sin \varphi$  in Eq. (2) with  $\varphi$ , the external background will obviously become a combination of *constant crossed* electric and magnetic fields,

$E_x = B_y = -E_0$ . In this case, one can also perform nonperturbative calculations of the polarization tensor [34–36] and then locally approximate a generic external background by constant crossed fields [24]. Applying this technique to the field configuration (2), one obtains

$$M_{\text{LCFA}}^{11} = \frac{1}{3\pi\xi^2} \int_{-1}^1 dv \left(\frac{\chi}{w}\right)^{2/3} (w-1)g(v), \quad (36)$$

$$M_{\text{LCFA}}^{22} = \frac{1}{3\pi\xi^2} \int_{-1}^1 dv \left(\frac{\chi}{w}\right)^{2/3} (w+2)g(v), \quad (37)$$

where  $\chi = 2\xi\eta$ ,  $w = 4/(1-v^2)$ , and

$$g(v) = \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi f'(u)(\cos\varphi)^{2/3}, \quad (38)$$

$$u = \left(\frac{w}{\chi \cos\varphi}\right)^{2/3}, \quad (39)$$

$$f(u) = i \int_0^{\infty} d\tau e^{-i(u\tau + \tau^3/3)} = \pi \text{Gi}(u) + i\pi \text{Ai}(u). \quad (40)$$

Here Gi and Ai are the Scorer and Airy functions, respectively.

Note that the integrals in Eqs. (36) and (37) depend only on  $\chi$ , i. e. the product  $\xi\eta$ , which simplifies the further analysis. This fact is a well-known property of the LCFA [37]. This approximation is well justified if the parameter  $\xi$  is sufficiently large, so one can expect that the predictions (36) and (37) significantly differ from the exact nonperturbative result given in Eq. (16) once  $\xi \lesssim 1$ . This issue will be discussed in detail in Sec. 7.

Finally, we present the asymptotic forms of Eqs. (36) and (37) in the case  $\chi \ll 1$ . One obtains

$$\text{Re } M_{\text{LCFA}}^{11} = -\frac{4\chi^2}{45\xi^2} \left[1 + \frac{1}{4}\chi^2 + \mathcal{O}(\chi^4)\right], \quad (41)$$

$$\text{Re } M_{\text{LCFA}}^{22} = -\frac{7\chi^2}{45\xi^2} \left[1 + \frac{13}{49}\chi^2 + \mathcal{O}(\chi^4)\right], \quad (42)$$

$$\text{Im } M_{\text{LCFA}}^{11} = -\frac{3\chi^{3/2}}{8\xi^2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-8/(3\chi)} [1 + \mathcal{O}(\chi)], \quad (43)$$

$$\text{Im } M_{\text{LCFA}}^{22} = -\frac{3\chi^{3/2}}{4\xi^2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-8/(3\chi)} [1 + \mathcal{O}(\chi)]. \quad (44)$$

For small  $\chi$  the imaginary part is exponentially suppressed corresponding to tiny probabilities of the photon decay. Note that the ratio  $\chi/\xi$  coincides with  $\varepsilon = 2\eta$  in Eqs. (32) and (33), so the leading-order contribution is reproduced by the LCFA. Nevertheless, the

validity of the LCFA and that of the PT expansion correspond to substantially different domains of parameters. Whereas for given  $\xi$  they both are accurate for sufficiently small  $\eta < \eta_{\text{max}}(\xi)$ , with increasing  $\xi$  the bound  $\eta_{\text{max}}(\xi)$  increases in the case of the LCFA and decreases in the case of PT. This will be quantitatively demonstrated in Sec. 7. Finally, we note that both the LCFA and PT capture the imaginary part of the polarization tensor.

### 5.2. Heisenberg – Euler approximation

Another approach is based on the PT expansion of the polarization operator derived from the one-loop effective Lagrangian in the presence of a constant electromagnetic background [23]. The approximate formula for the  $\xi^2$  contribution to the polarization tensor has the following form:

$$\Pi_{\text{LCFA-HE}}^{\mu\nu}(q, k) = \frac{\alpha}{45\pi} \frac{e^2}{m^4} \int d^4x e^{i(k-q)x} \times [4(qF)^\mu(kF)^\nu + 7(qG)^\mu(kG)^\nu]. \quad (45)$$

Here

$$(kF)^\mu \equiv k_\rho F^{\rho\mu}.$$

The electromagnetic tensor

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu$$

and the dual tensor

$$G^{\mu\nu} = (1/2)\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}$$

are evaluated at the spacetime point  $x$  according to the local treatment of the external field. In the case of the plane-wave background (1), the integrals in Eq. (45) lead to the conservation laws which may change the photon momentum by  $\pm 2\omega$  or keep it the same. We are interested in the latter contribution governing the elastic process. The explicit form of Eq. (45) then reads

$$\Pi_{\text{LCFA-HE, elastic}}^{\mu\nu}(q, k) = \frac{32\pi^3\alpha}{45} m^2 \xi^2 \left(\frac{\omega q_0}{m^2}\right)^2 \times \delta(k-q) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (46)$$

This exactly corresponds to the leading low-energy terms in Eqs. (32) and (33) and to the leading-order terms in Eqs. (41) and (42). In what follows, they will be denoted by  $M_{\text{LCFA-HE}}^{11}$  and  $M_{\text{LCFA-HE}}^{22}$ , respectively. Note that the leading-order LCFA expressions completely disregard the imaginary part of the polarization tensor, i. e., fail to describe the process of dichroism.

### 6. DIRECT EVALUATION OF THE FEYNMAN DIAGRAMS

Here we will directly compute the Feynman diagrams depicted in Fig. 2. The corresponding amplitudes and accordingly the contributions to the polarization tensor are proportional to  $E_0^2$ , i. e.  $\xi^2$  [cf. Eq. (25)]. Each interaction vertex involves the energy-momentum transfer with the four-vector  $\pm K$ , where  $K^\mu \equiv \omega n^\mu$  is the four-momentum of the photons that constitute the external plane wave. As we are interested in studying the elastic contributions, the two vertices in each diagram should correspond to one emission and one absorption, so the diagram represents essentially a two-to-two scattering process. Since one has to evaluate three diagrams, the leading-order matrix  $M_{\text{LO}}^{\mu\nu}$  is a sum of three terms,  $M_{\text{LO}}^{\mu\nu} = M_1^{\mu\nu} + M_2^{\mu\nu} + M_3^{\mu\nu}$ . Considering, for instance, the first diagram and using the Feynman rules, we obtain the following expression for  $M_1^{\mu\nu}$ :

$$M_1^{\mu\nu} = -\frac{i}{8\pi^2} \sum_{s=\pm 1} \int d^4 p \times \text{Tr} [\gamma^\nu S(p + q/2 - sK/2) \times \gamma^1 S(p + q/2 + sK/2) \times \gamma^\mu S(p - q/2 + sK/2) \times \gamma^1 S(p - q/2 - sK/2)]. \quad (47)$$

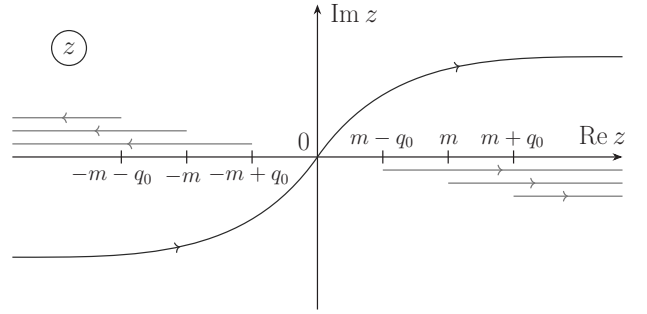
Here  $s$  indicates at which of the two vertices the external-field photon is emitted (absorbed). The integration variables  $p^\mu$  are shifted, so that the integrand has a more symmetric form (cf. Ref. [38]). The electron propagator is given by

$$S(p) = \frac{\gamma^\mu p_\mu + m}{m^2 - p^2 - i\varepsilon}, \quad (48)$$

where  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

One can explicitly verify that the total expression for  $M_{\text{LO}}^{\mu\nu}$  depends only on the product  $\omega q_0$ , i. e.  $\eta = \omega q_0/m^2$ , in accordance with Eqs. (26) and (27). Therefore, we will assume that  $q_0 = \omega = \sqrt{\eta}m$ , so  $\mathbf{K} = -\mathbf{q}$ . Then Eq. (47) takes the form

$$M_1^{\mu\nu} = -\frac{i}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int d^3 \mathbf{p} \times \text{Tr} [\gamma^\nu S(z, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \gamma^1 S(z + q_0, \mathbf{p}) \times \gamma^\mu S(z, \mathbf{p} - \mathbf{q}) \gamma^1 S(z - q_0, \mathbf{p}) + \gamma^\nu S(z + q_0, \mathbf{p}) \gamma^1 S(z, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \times \gamma^\mu S(z - q_0, \mathbf{p}) \gamma^1 S(z, \mathbf{p} - \mathbf{q})]. \quad (49)$$

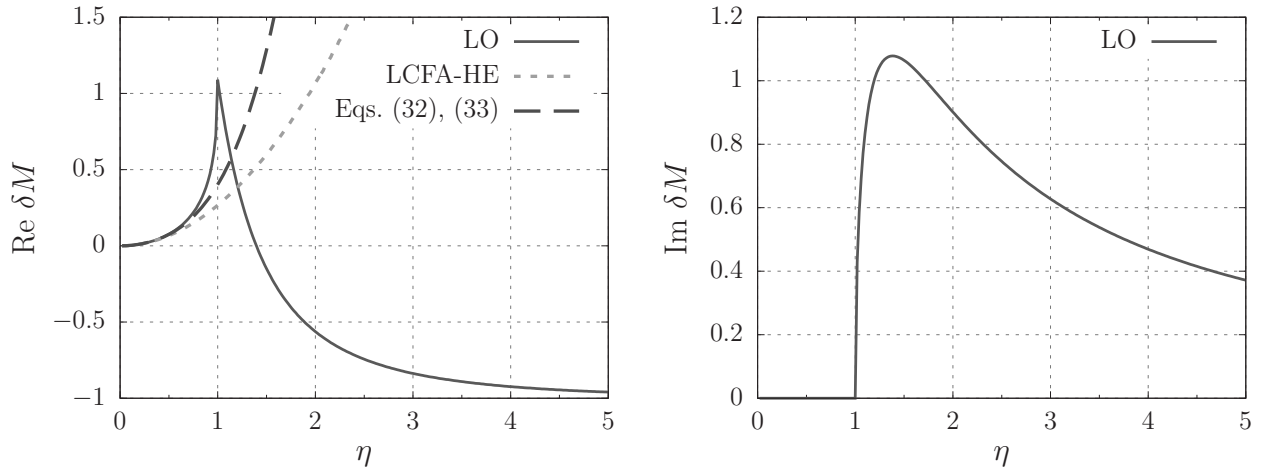


**Fig. 3.** Branch cuts (red) of the electron propagators in the case  $q_0 < m$  before the  $z$  integration in Eq. (49) and a possible integration contour (blue).

The trace contains denominators that for each  $\mathbf{p}$  turn to zero at complex points  $z$  with small nonzero imaginary parts for nonzero values of  $\varepsilon$ . After the  $\mathbf{p}$  integration, the trace as a function of  $z$  possesses six branch cuts depicted in Fig. 3 for  $q_0 < m$ . The  $z$  integration over the real axis in Eq. (49) can be, in fact, performed over any contour like that displayed in Fig. 3, provided it does not intersect any of the branch cuts. In the case  $q_0 < m$  ( $\eta < 1$ ), one can, for instance, rotate the contour, so that it coincides with the imaginary axis. Substituting then  $z = iw$ , where  $w \in \mathbb{R}$ , one can explicitly demonstrate that the total contribution  $M_{\text{LO}}^{\mu\nu} = M_1^{\mu\nu} + M_2^{\mu\nu} + M_3^{\mu\nu}$  is real in accordance with Eqs. (26) and (27).

In order to address the high-energy case  $\eta > 1$ , we employ the following numerical procedure. We change the order of the  $z$  and  $\mathbf{p}$  integrations and first integrate over  $z \in \mathbb{R}$ . Accordingly, the  $z$  integrand has a number of isolated poles  $\xi_j - i\sigma\varepsilon$  where  $\sigma = \pm 1$  and the real parts  $\xi_j$  depend on  $\mathbf{p}$ . In each vicinity ( $\xi_j - \delta, \xi_j + \delta$ ) we perform the integration semi-analytically by means of the Sokhotski–Plemelj identity. This allows us to set  $\varepsilon = 0$  while performing the rest integrations numerically and avoid computational singularities.

Our procedure was also generalized to compute the diagrams for arbitrary independent  $q_0$  and  $\omega$ . The main steps here are generally the same. After that, we confirmed the results obtained by means of the technique described above. Finally, we note that the expression (49) has a similar form to the amplitude of photon emission via the so-called tadpole diagram (see Ref. [39], where it was evaluated in the regime  $\eta < 1$ ).



**Fig. 4.** Real and imaginary parts of the difference  $\delta M \equiv M^{11} - M^{22}$  calculated within the leading-order of perturbation theory [Eqs. (26) and (27)], by means of the Heisenberg–Euler approximation (46) and according to the low-energy expansions (32) and (33). The latter two approaches yield zero imaginary part

### 7. NUMERICAL RESULTS

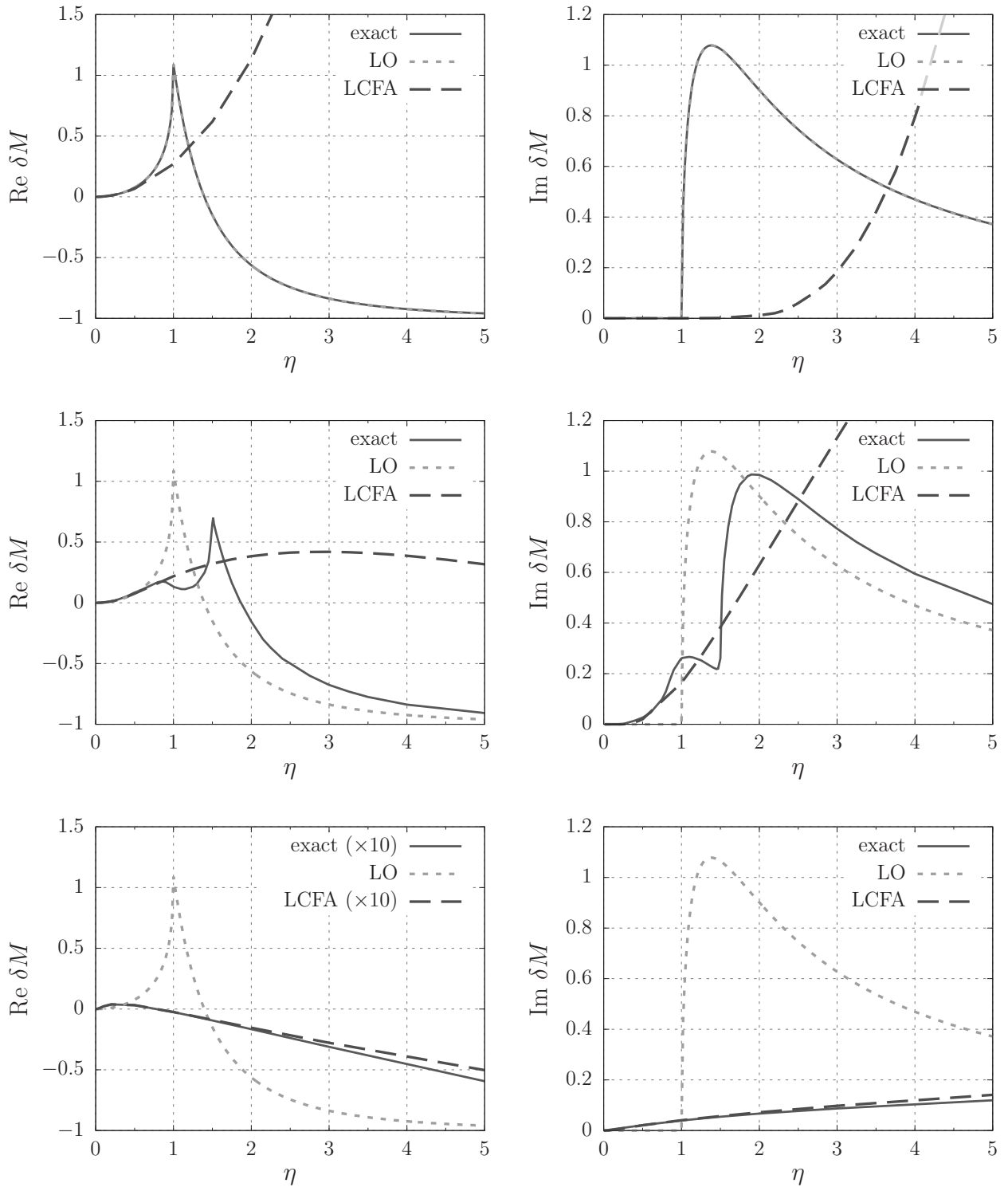
We will now perform numerical calculations of the difference  $\delta M \equiv M^{11} - M^{22}$ , whose real and imaginary parts govern the effects of vacuum birefringence and dichroism, respectively. First, we will evaluate  $\delta M$  within the leading order with respect to the field amplitude. In this case, the results do not depend on  $\xi$ . In Fig. 4 we present  $\delta M$  as a function of  $\eta$ . First, one observes that the Heisenberg–Euler approximation within the leading order of perturbation theory can be accurate only in the low-energy regime. If one takes into account the  $\eta^4$  terms according to Eqs. (32) and (33), the results become slightly more accurate although they completely fail to reproduce the full PT results for  $\eta > 1$ . Second, the more general expressions (26) and (27) yield a nonzero imaginary part for  $\eta > 1$ , so the PT approach may allow one to describe the effects of dichroism. Finally, we note that our approach based on direct computations of the Feynman diagrams as described in Sec. 6 provides exactly the same results as Eqs. (26) and (27), which benchmarks the corresponding numerical procedures. To judge whether the leading-order approximation is justified, one has to perform nonperturbative calculations for various values of  $\xi$ , which will be done next.

In Fig. 5 we display the real and imaginary parts of  $\delta M$  as a function of  $\eta$  for three different values of  $\xi$ : 0.1, 1.0, and 10.0. We refer to Eq. (16) as the *exact* result. First, we observe that the  $\eta$  dependence very nontrivially changes as a function of  $\xi$ , which cannot be taken

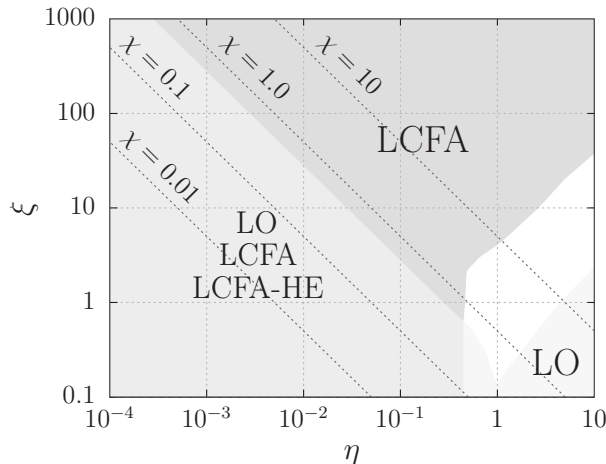
into account by means of the PT approach. Whereas for  $\xi \ll 1$ , this approximation provides indeed very accurate results within a broad range of  $\eta$ , for  $\xi \gtrsim 1$ , it fails to reproduce the exact values unless  $\eta \ll 1$ . Second, as was mentioned above, the LCFA predictions have the form  $\delta M_{\text{LCFA}}(\xi, \eta) = (1/\xi^2)\delta M_{\text{LCFA}}(1, \xi\eta)$ , so the different LCFA curves can be obtained by simply rescaling the plot axes. This approach does not allow one to describe the nontrivial structure that takes place for  $\xi \lesssim 1$ , although it is accurate for very small  $\eta$ , where the expansions (41) and (42) are valid.

Let us now quantitatively identify the domains of validity of various approximations for describing the vacuum birefringence effects. In Fig. 6 we identify the values of  $\xi$  and  $\eta$  for which the approximate predictions match the exact results with a relative uncertainty on the level of 10%. First, let us discuss the PT approach, which yields the leading-order estimates (26) and (27). In the regime  $\xi \gg 1$ , it is only valid for  $\eta \ll 1$ . It turns out that in the corresponding domain of parameters  $\chi \lesssim 0.5$ . Since for large values of  $\xi$  one can employ the LCFA, it is possible to estimate the exact result for the real part of  $M^{\mu\nu}$  by means of Eqs. (41) and (42). Comparing these with the low-energy asymptotic expansions (32) and (33), one can obtain the threshold value of  $\chi$ . For instance, requiring that the relative uncertainty of PT be less than 10%, one obtains  $\chi < \sqrt{(7/2)}0.1 \approx 0.59$ . According to our numerical analysis, this condition, in fact, reads  $\chi < 0.55$ . In the regime  $\xi \lesssim 1$ , the validity of the LCFA (36), (37) is very limited, so one has to directly compare the leading-





**Fig. 5.** Real and imaginary parts of the difference  $\delta M \equiv M^{11} - M^{22}$  evaluated within the leading-order of perturbation theory [LO, Eqs. (26) and (27)], by means of the LCFA [Eqs. (36) and (37)] and exact nonperturbative expression (16) for  $\xi = 0.1$  (top),  $\xi = 1.0$  (middle),  $\xi = 10.0$  (bottom). For  $\xi = 0.1$  the «LO» and exact curves coincide



**Fig. 6.** Domains of the validity of the various approximate methods for describing vacuum birefringence: LCFA based on using the polarization tensor in constant crossed fields (LCFA), Heisenberg–Euler approximation (LCFA-HE), and PT calculations within the leading order in terms of the external-field amplitude (LO)

order PT results with the nonperturbative predictions. In this domain, the applicability of perturbation theory is not solely governed by  $\chi$  as can be seen in Fig. 6, where the domain of the PT applicability is no longer bounded by a straight line. Finally, we note that in the region  $\xi \lesssim 1$ , even if the PT approach fails to reproduce the exact results for  $\eta \sim 1$ , it may provide quite accurate predictions for sufficiently large values of  $\eta$ , where  $\text{Re } \delta M$  becomes close to  $-1$  [see Fig. 5 (middle)]. Moreover, in this region the nonzero imaginary part of the polarization operator can also be obtained by means of perturbation theory.

In order to identify the validity domain of the leading-order Heisenberg–Euler approximation (46), it is sufficient to compare its predictions with the leading-order PT result (26), (27). Since within these approaches the matrix  $M^{\mu\nu}$  is independent of  $\xi$ , one should only determine the threshold value of  $\eta$ . For the 10% uncertainty level, it amounts to  $\eta_{\text{max}} \approx 0.44$ . The validity domain of the Heisenberg–Euler approximation is then the intersection of the region  $\eta < 0.44$  and the validity domain of the PT approach. Note that the fact that the leading-order Heisenberg–Euler approximation is only valid for sufficiently small  $\chi$  and  $\eta$  was also discussed in Ref. [21] from the general perspective of the derivative expansion of the effective Lagrangian.

The applicability of the LCFA (36), (37) corresponds to a much larger region than that where the Heisenberg–Euler approximation is justified. It not

only describes the effect of birefringence in the low-energy domain but is also valid in the case of high-energy probe photons ( $\eta \gtrsim 1$ ), provided  $\xi \gg 1$ .

As was indicated above, the imaginary part of the polarization tensor, which is responsible for dichroic properties of the vacuum, cannot be estimated by means of the leading-order Heisenberg–Euler approximation (46). Nevertheless, both the PT approach and the LCFA (36), (37) are very useful here — they can be employed within the corresponding regions indicated in Fig. 6.

According to our results, the validity domain of the Heisenberg–Euler approximation is the smallest. The corresponding results can always be additionally confirmed by either perturbation theory or the LCFA based on the calculation of the polarization operator in constant crossed fields. The advantage of the latter approach is the possibility to consider larger values of  $\eta$  once  $\xi \gtrsim 1$ . Note also that a considerable part of the plot in Fig. 6 relates to large values of the parameter  $\chi$ , which are not realistic at present. Nevertheless, given the logarithmic scale in the graph, the LCFA covers a domain of parameters which is substantially broader than the validity region of the Heisenberg–Euler approximation. The PT approach is always accurate once the LCFA-HE technique is justified. In addition, the leading-order predictions coincide with the exact results for any values of  $\eta$  if  $\xi$  is sufficiently small.

## 8. CONCLUSION

In the present investigation, we examined the effects of vacuum birefringence and dichroism in strong plane-wave backgrounds by means of several theoretical methods allowing one to evaluate the leading one-loop contribution to the polarization operator. First, we employed closed-form expressions exactly incorporating the interaction between the electron-positron field and classical external background depending on the spatiotemporal coordinates. Second, we performed calculations within the leading order with respect to the field amplitude, i. e., by means of perturbation theory. This was done by expanding the nonperturbative result and by means of our numerical method based on a direct evaluation of the leading-order Feynman diagrams. It was found that these two approaches yield identical quantitative predictions both for real and imaginary parts of the polarization tensor. Varying the field parameters and the probe-photon energy, we examined

the validity of the perturbative methods. Third, we utilized the locally-constant field approximation (LCFA) in two different forms: Heisenberg–Euler approximation and the technique involving exact expressions for the polarization operator in constant crossed fields. By comparing the approximate predictions with the exact results, we evidently identified the field and probe-photon parameters for which each of the approximate techniques is justified.

An important prospect for future studies is the analogous analysis beyond the plane-wave scenario, where the exact analytical expressions are unknown. In this case, for instance, the applicability of the LCFA may be additionally limited if the external electric and magnetic fields are not crossed in contrast to the field configuration examined in the present investigation.

**Funding.** The study was funded by RFBR and ROSATOM, project № 20-21-00098. I. A. A. also acknowledges the support from the Foundation for the advancement of theoretical physics and mathematics «BASIS».

## REFERENCES

1. H. Euler and B. Kockel, *Naturwiss.* **23**, 246 (1935).
2. W. Heisenberg and H. Euler, *Z. Phys.* **98**, 714 (1936).
3. V. Weisskopf, *Kong. Dans. Vid. Selsk., Mat.-fys. Medd.* **XIV**, 6 (1936).
4. R. Karplus and M. Neuman, *Phys. Rev.* **80**, 380 (1950); **83**, 776 (1951).
5. F. Sauter, *Z. Phys.* **69**, 742 (1931).
6. J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 664 (1951).
7. A. Di Piazza, C. Müller, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1177 (2012).
8. B. S. Xie, Z. L. Li, and S. Tang, *Matter Radiat. Extremes* **2**, 225 (2017).
9. A. Fedotov, A. Ilderton, F. Karbstein, B. King, D. Seipt, H. Taya, and G. Torgrimsson, *Phys. Rep.* **1010**, 1 (2023).
10. J. S. Toll, Ph.D. thesis, Princeton Univ., 1952 (unpublished).
11. R. Baier and P. Breitenlohner, *Acta Phys. Austriaca* **25**, 212 (1967).
12. R. Baier and P. Breitenlohner, *Nuovo Cimento B* **47**, 117 (1967).
13. V. N. Baier, A. I. Milstein, and V. M. Strakhovenko, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69**, 1893 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **42**, 961 (1976)].
14. W. Becker and H. Mitter, *J. Phys. A* **8**, 1638 (1975).
15. I. A. Aleksandrov, A. Di Piazza, G. Plunien, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. D* **105**, 116005 (2022).
16. A. Di Piazza, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 083603 (2006).
17. T. Heinzl, B. Liesfeld, K. U. Amthor, H. Schworerer, R. Sauerbrey, and A. Wipf, *Opt. Commun.* **267**, 318 (2006).
18. V. Dinu, T. Heinzl, A. Ilderton, M. Marklund, and G. Torgrimsson, *Phys. Rev. D.* **89**, 125003 (2014).
19. F. Karbstein, H. Gies, M. Reuter, and M. Zepf, *Phys. Rev. D.* **92**, 071301(R) (2015).
20. F. Karbstein and E. A. Mosman, *Phys. Rev. D* **101**, 113002 (2020).
21. F. Karbstein, *Annalen Phys.* **534**, 2100137 (2022).
22. F. Karbstein, D. Ullmann, E. A. Mosman, and M. Zepf, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 061802 (2022).
23. F. Karbstein and R. Shaisultanov, *Phys. Rev. D* **91**, 085027 (2015).
24. S. Meuren, C. H. Keitel, and A. Di Piazza, *Phys. Rev. D* **88**, 013007 (2013).
25. S. Bragin, S. Meuren, C. H. Keitel, and A. Di Piazza, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 250403 (2017).
26. B. King and N. Elkina, *Phys. Rev. A* **94**, 062102 (2016).
27. Y. Nakamiya and K. Homma, *Phys. Rev. D* **96**, 053002 (2017).
28. I. A. Aleksandrov, G. Plunien, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. D* **99**, 016020 (2019).

29. D. G. Sevostyanov, I. A. Aleksandrov, G. Plunien, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. D* **104**, 076014 (2021).
30. I. A. Aleksandrov, D. G. Sevostyanov, and V. M. Shabaev, *Symmetry* **14**, 2444 (2022).
31. I. A. Aleksandrov, D. G. Sevostyanov, and V. M. Shabaev, arXiv:2210.15626.
32. H. Gies, F. Karbstein, and R. Shaisultanov, *Phys. Rev. D* **90**, 033007 (2014).
33. V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics* (Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, 1982).
34. I. A. Batalin and A. E. Shabad. FIAN Preprint **166**, (1968).
35. N. B. Narozhnyi, *Sov. Phys. JETP* **28**, 371 (1969).
36. V. I. Ritus, *Ann. Phys.* **69**, 555 (1972).
37. V. I. Ritus, *J. Sov. Laser Res.* **6**, 497 (1985).
38. I. A. Aleksandrov and V. M. Shabaev, *Optics and Spectroscopy* **129**, 890 (2021).
39. I. A. Aleksandrov, G. Plunien, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. D* **100**, 116003 (2019).

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ЭНЕРГИИ В ВОДЕ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦЫ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ФОТОНАМИ РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА

*А. П. Чайников\**, *А. Г. Кочур*, *А. И. Дуденко*

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

Поступила в редакцию 4 апреля 2024 г.,  
после переработки 10 апреля 2024 г.  
Принята к публикации 12 апреля 2024 г.

Методом Монте-Карло проведено моделирование процессов вторичной ионизации и поглощения энергии в воде вокруг золотых наночастиц диаметром от 2 до 100 нм после фотоионизации наночастиц фотонами с энергиями в диапазоне от 20 до 80 кэВ. Рассчитаны спектры испускаемых наночастицами вторичных фотонов и электронов, возникающих в процессе каскадных распадов внутренних вакансий в ионизированных атомах золота. Рассчитаны средние энергии, переизлучаемые наночастицами вместе с вторичными фотонами и электронами, в зависимости от диаметра наночастиц, а также радиальные зависимости локальной поглощенной дозы в воде вблизи поверхности наночастиц различного диаметра. Показано, что большую часть энергии поглощенных наночастицей первичных фотонов наночастица переизлучает вместе с фотоэлектронами и оже-электронами. При этом наибольший вклад в количество актов вторичной ионизации и поглощенную дозу вблизи поверхности наночастицы вносят оже-электроны, образующиеся в результате каскадной релаксации вакансий во внутренних электронных оболочках атомов золота.

DOI: 10.31857/S0044451024080054

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в фотонной терапии онкологических заболеваний интенсивно исследуются радиосенсибилизаторы на основе металлических наночастиц (НЧ) [1–3]. Доставка наночастиц непосредственно в опухолевую ткань с последующим облучением жестким рентгеновским излучением позволяет существенно увеличить поглощенную дозу внутри опухоли и минимизировать радиационные повреждения здоровых тканей.

Физическая основа принципа действия радиосенсибилизаторов на основе наночастиц металлов с высоким атомным номером состоит в следующем. Во-первых, благодаря тому, что сечение фотоионизации возрастает с увеличением атомного номера, введение в опухоль наночастиц, содержащих тяжелые атомы, приводит к увеличению вероятности поглощения фотонов внутри опухоли. Во-вторых, при фотоионизации атомов наночастиц фотонами жест-

кого рентгеновского излучения ионизируются преимущественно внутренние оболочки атомов наночастиц, распад вакансий в которых представляет собой каскад последовательных радиационных и безрадиационных переходов. При этом, как было показано в работах [4–6] на примере распада вакансий в *K*- и *L*-оболочках атомов Fe, Ag и Au, испускается достаточно большое количество оже-электронов с энергией от 10 эВ до 15 кэВ, которые вместе с фотоэлектроном уносят с собой большую часть энергии первоначально поглощенного фотона. В-третьих, средняя неупругая длина свободного пробега оже-электронов в воде и биологических тканях составляет от 1 до 10 нм. В результате этого оже-электроны, испускаемые ионизированной наночастицей, обладают высокой тормозной способностью и могут произвести большое количество актов вторичной ионизации в непосредственной близости от поверхности наночастицы внутри раковой клетки, вызывая радиолит молекул воды и образование активных форм кислорода, приводящих к оксидативному стрессу и гибели раковых клеток.

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

При разработке радиосенсibilизаторов на основе наночастиц необходимо иметь количественную информацию об энергетических спектрах испускаемых ими фотонов и электронов, о количестве и пространственном распределении вызываемых ими актов вторичной ионизации и о поглощенной в этих актах энергии, а также необходимо знать зависимости данных характеристик от состава и размера наночастиц и от энергии первичных фотонов. Поскольку экспериментальное определение данных характеристик на нанометровом масштабе внутри клетки вряд ли возможно, традиционным подходом для решения данной задачи является проведение компьютерного моделирования методом Монте-Карло. Хороший обзор на тему применения метода Монте-Карло для моделирования процессов радиосенсibilизации с использованием металлических наночастиц дан в работе [7].

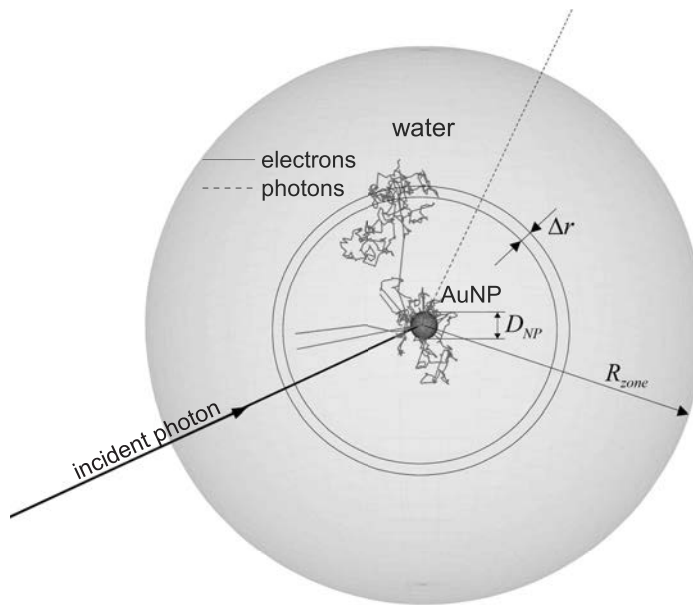
В настоящее время существуют хорошо зарекомендовавшие себя и всесторонне апробированные пакеты компьютерных программ для моделирования методом Монте-Карло процессов взаимодействия ионизирующих излучений с веществом, такие как Geant4-DNA [8, 9] и PENELOPE [10]. Однако необходимо отметить, что процессы каскадного распада внутренних вакансий, играющие одну из главных ролей в механизме радиосенсibilизации, в указанных пакетах компьютерных программ описываются достаточно грубо. Ключевыми характеристиками при описании каскадной релаксации электронных вакансий в атомах являются парциальные ширины и энергии радиационных и безрадиационных переходов. В Geant4-DNA и PENELOPE используются парциальные ширины и энергии переходов из библиотеки EADL [11], в которой представлены данные для переходов из электронных конфигураций с одной вакансией. В то же время каскадный распад глубокой вакансии в тяжелом атоме может состоять из большого числа безрадиационных переходов. Например, в результате распада  $2s$ -вакансии в ионе золота  $Au^+$  испускается в среднем 9.2 электронов [12]. Таким образом, многие каскадные переходы при распаде внутренних вакансий происходят в многодырочных электронных конфигурациях. Как было показано в работах [13–15], использование при описании каскадных распадов глубоких вакансий энергий переходов из однодырочных конфигураций приводит к ошибочному учету запрещенных по энергии безрадиационных переходов, существенному искажению деревьев распада и, как следствие, к значительным погрешностям в рассчитываемых характеристиках каскадных распадов вакансий.

С другой стороны, в настоящее время имеются хорошо разработанные методы описания каскадных распадов вакансий в изолированных атомах (см. [13] и ссылки там). В работах [16, 17] был развит метод описания процессов каскадного распада вакансий путем построения и анализа дерева распада. В этом методе энергия перехода рассчитывается как разность средних полных энергий начальной и конечной многодырочных конфигураций перехода, а также учитывается возможное перекрытие мультиплетов начальной и конечной конфигураций с помощью метода глобальных характеристик атомных спектров [18]. Кроме того, в [16, 17] был предложен способ простого и достаточно точного учета влияния электронной конфигурации на парциальные ширины переходов.

Метод построения и анализа дерева распада был применен в работах [6, 12, 13, 19] для описания распадов вакансий во внутренних оболочках изолированного атома золота. В [12, 13] были рассчитаны зарядовые спектры конечных ионов золота, образующихся в результате каскадных распадов внутренних вакансий в различных подоболочках. В [6, 19] рассчитаны спектры фотонов и электронов, испускаемых в ходе каскадной релаксации вакансий, определены средние энергии, переизлучаемые атомом золота вместе с фотонами и электронами, а также рассчитаны зависимости переизлучаемых энергий от энергии первичного фотона, ионизирующего атом золота, в диапазоне от 0.01 до  $10^3$  кэВ.

Предложенные в [16, 17] приближения для расчета энергий и парциальных ширин переходов при описании каскадного распада вакансий были в дальнейшем реализованы в алгоритме Монте-Карло для моделирования воздействия ионизирующих излучений на вещество [20–23].

В [22] методом Монте-Карло были рассчитаны спектры фотонов и электронов, испускаемых изолированными железными наночастицами диаметром от 2 до 130 нм при поглощении фотонов с энергией до 11 кэВ. Определены энергии, поглощаемые наночастицей и переизлучаемые ею в окружающую среду вместе со вторичными фотонами и электронами. Установлено, что при энергии первичных фотонов до порога ионизации  $K$ -оболочки атома Fe большая часть энергии поглощенного фотона переизлучается наночастицей вместе с вторичными электронами (прежде всего фото- и оже-электронами) с энергией, достаточной для ионизации молекул воды. При энергии же первичных фотонов за  $K$ -порогом значительную часть энергии из наночастицы уносит  $2p - 1s$ -фотон, испускаемый с большой вероятностью.



**Рис. 1.** Схема, иллюстрирующая проведение эксперимента Монте-Карло. Черная сплошная линия — падающий на наночастицу первичный фотон, красные сплошные линии — треки вторичных электронов, зеленые пунктирные линии — вторичные фотоны

стью на первом шаге распада  $1s$ -вакансии в атоме железа. С увеличением диаметра наночастицы увеличивается количество испускаемых ею низкоэнергетических электронов с энергией до  $10\text{ эВ}$ . Они образуются в актах вторичной ионизации электронным ударом атомов железа внутри наночастицы. Такие низкоэнергетические электроны не способны ионизировать молекулы тканей, окружающих наночастицу, но могут приводить к разрушению молекул ДНК по механизму диссоциативного присоединения электронов [24].

В [23] проведено моделирование методом Монте-Карло диссипации энергии в воде при каскадных распадах внутренних вакансий в находящемся в воде ионе железа  $\text{Fe}^+$ . Рассчитаны зависимости поглощенной дозы от расстояния от иона железа. Установлено, что распад одиночной  $\text{Fe}1s$ -вакансии индуцирует в среднем 232 акта вторичной ионизации молекул воды электронным ударом, в которых поглощается примерно  $3274\text{ эВ}$ , и 18 актов вторичной фотоионизации, в которых поглощается  $256\text{ эВ}$ .

В данной работе метод Монте-Карло, реализованный в [20–23], применяется для исследования процессов поглощения энергии, происходящих в воде вблизи поверхности золотой наночастицы, облучаемой фотонами с энергией от  $20$  до  $80\text{ кэВ}$ . Целью данной работы является расчет радиального распределения актов вторичной ионизации и поглощенной дозы в зависимости от энергии первичных фотонов и диаметра наночастицы.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА

Моделирование процессов взаимодействия фотонов и электронов с атомами проводится в сферической зоне взаимодействия с радиусом  $R_{zone} = 100\text{ мкм}$ , который примерно в  $10$  раз превосходит характерный линейный размер раковых клеток. В центре зоны взаимодействия располагается золотая наночастица с диаметром  $D_{NP}$  от  $2$  до  $100\text{ нм}$ , а пространство снаружи наночастицы заполнено водой (рис. 1). Наночастица и вода рассматриваются в приближении невзаимодействующих атомов. Объемная концентрация атомов золота в наночастице равна  $n_{Au} = 5.90 \cdot 10^{22}\text{ см}^{-3}$ , что соответствует плотности твердого золота  $19.3\text{ г/см}^3$ . Концентрации атомов кислорода и водорода в воде,  $n_O = 3.34 \cdot 10^{22}\text{ см}^{-3}$  и  $n_H = 2n_O$ , соответствуют жидкой воде с плотностью  $1\text{ г/см}^3$ .

Каждое Монте-Карло-испытание начинается с фотоионизации одного из атомов наночастицы фотоном с энергией  $h\nu$ . Место начальной фотоионизации выбирается случайным образом в предположении равномерного поглощения фотона в любой точке внутри наночастицы, поскольку средняя длина свободного пробега падающих фотонов во много раз больше диаметра НЧ. Выбор ионизируемой  $nl_j$ -подоболочки атома золота проводится с помощью генератора случайных чисел на основе парциальных сечений фотоионизации. В результате первичной фотоионизации образуется фотоэлектрон, который добавляется в список вторичных электронов

для дальнейшего моделирования его трека в зоне взаимодействия, а в ионизированном атоме создается вакансия в  $nl_j$ -подоболочке. Далее запускается процедура моделирования каскадного распада образовавшейся вакансии.

### 2.1. Моделирование каскадного распада вакансии

Пусть  $C^{(0)}$  есть начальная электронная конфигурация ионизированного атома золота с вакансией в  $nl_j$ -подоболочке. На первом шаге распада анализируются все энергетически и симметрично разрешенные радиационные и безрадиационные (Оже, Костера–Кронига и супер-Костера–Кронига) переходы из конфигурации  $C^{(0)}$  в конфигурации  $C_\alpha^{(1)}$ . Для каждого разрешенного перехода  $C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)}$  рассчитываются парциальные ширины  $\Gamma(C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)})$  и определяются относительные вероятности  $\chi(C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)})$ , называемые также отношениями ветвления (branching ratios):

$$\chi(C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)}) = \frac{\Gamma(C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)})}{\sum_{\alpha'} \Gamma(C^{(0)} \rightarrow C_{\alpha'}^{(1)})}. \quad (1)$$

После этого с помощью генератора случайных чисел на основе рассчитанных отношений ветвления (1) выбирается один из возможных переходов  $C^{(0)} \rightarrow C_\alpha^{(1)}$ , а испущенный в результате выбранного перехода фотон (при выборе радиационного перехода) или электрон (в случае безрадиационного перехода) добавляется в список вторичных фотонов и электронов для дальнейшего моделирования их распространения.

Если образовавшаяся в результате первого шага распада конфигурация  $C_\alpha^{(1)}$  имеет вакансии во внутренних подоболочках, моделирование каскадного распада продолжается. Анализируются переходы с заполнением каждой из имеющихся в конфигурации  $C_\alpha^{(1)}$  внутренней вакансии и для всех разрешенных переходов рассчитываются парциальные ширины и отношения ветвления. Затем на основе рассчитанных отношений ветвления случайным образом выбирается один из переходов  $C_\alpha^{(1)} \rightarrow C_\beta^{(2)}$ , а испущенный в результате перехода фотон или электрон пополняет список анализируемых вторичных частиц.

Моделирование каскадного распада вакансий продолжается до тех пор, пока после очередного шага не будет выбран переход, приводящий к образованию устойчивой ионной конфигурации, в которой все вакансии находятся в самой внешней подоболочке.

Энергии каскадных переходов рассчитываются как разности средних энергий начальной и конечной ионных конфигураций перехода, предварительно рассчитанных в приближении Паули–Фока [25, 26] с учетом спин-орбитального расщепления. Мультиплетная структура уровней, обусловленная электростатическим взаимодействием электронов, учитывается приближенно с помощью метода глобальных характеристик атомных спектров [18]. В случае близко лежащих по энергии конфигураций для учета перекрытия мультиплетов проводится корректировка энергии и парциальной ширины перехода, подробно описанная в [13]. Всего для проведения моделирования каскадных распадов вакансий в атоме золота потребовалось оптимизировать 86592 различных многодырочных ионных конфигураций.

Для расчета парциальных ширин радиационных и безрадиационных переходов используются радиальные части атомных орбиталей, рассчитанных в приближении Паули–Фока. При этом используется приближение, предложенное в работах [16, 17], с помощью которого удается относительно просто и с приемлемой точностью рассчитывать ширины переходов в произвольных ионных конфигурациях, содержащих произвольное число вакансий в различных подоболочках. Подробное описание процедуры расчета парциальных ширин переходов в произвольных многодырочных конфигурациях дано в работах [13, 23]. Также в [13] приведены рассчитанные парциальные ширины радиационных и безрадиационных переходов в атоме золота с одной вакансией.

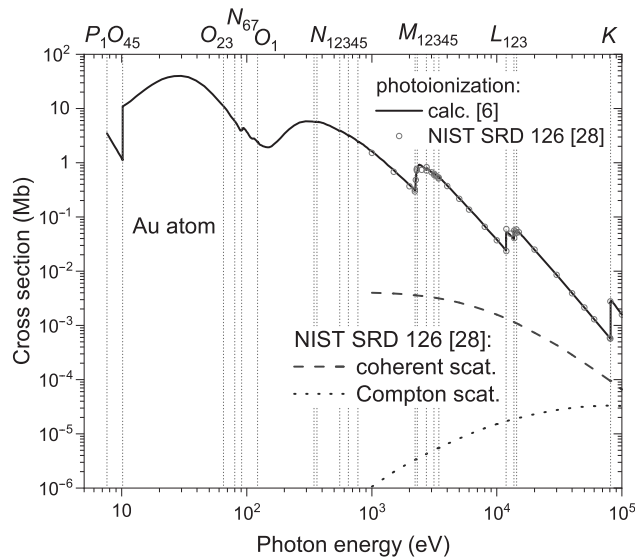
### 2.2. Моделирование распространения вторичных фотонов и электронов

После завершения моделирования каскадного распада вакансии в первоначально ионизированном внутри НЧ атоме золота начинается моделирование распространения вторичных фотонов и электронов. Распространение вторичных частиц в зоне взаимодействия рассматривается в приближении парных столкновений, в рамках которого взаимодействие рассматриваемой частицы с веществом представляет собой совокупность последовательных актов взаимодействия частицы с отдельными атомами вещества [27]. Между двумя такими последовательными актами взаимодействия (излучения, поглощения или рассеяния) частица (фотон или электрон) движется прямолинейно. Длина свободного пробега частицы  $s$  генерируется на основе средней длины свободного пробега  $\lambda$ :

$$s = -\lambda \ln(\xi), \quad (2)$$

где  $\xi$  — значение случайной величины с равномер-





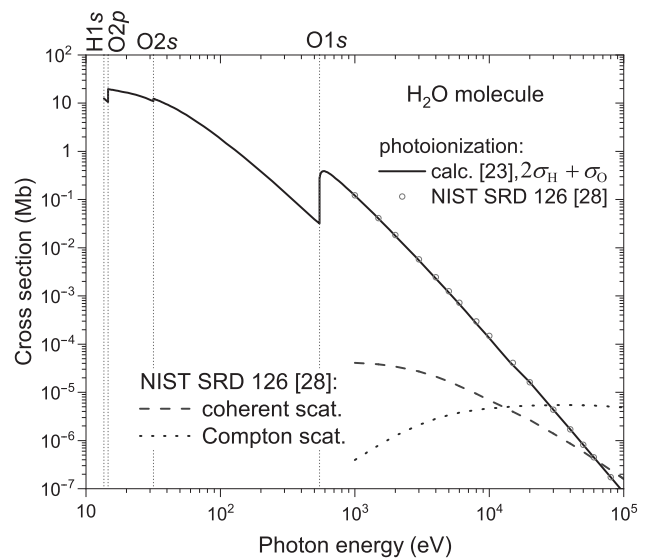
**Рис. 2.** Сечения взаимодействия фотона с атомом Au. Сплошная линия — полное сечение фотоионизации, рассчитанное в [6] и используемое в настоящей работе. Данные базы NIST SRD 126 [28]: кружки — сечение фотоионизации, штриховая линия — сечение когерентного рассеяния, пунктирная линия — сечение комптоновского рассеяния. Вертикальными пунктирными линиями отмечены пороги ионизации Au

ным законом распределения на интервале (0; 1). Средняя длина свободного пробега частицы в веществе рассчитывается на основе сечений взаимодействия рассматриваемой частицы с атомами среды  $\sigma_a$  и атомных концентраций  $n_a$ :

$$\lambda = \frac{1}{\sum_a n_a \sigma_a}. \quad (3)$$

В случае если рассматриваемая частица находится внутри НЧ, то средняя длина ее свободного пробега рассчитывается на основе сечений взаимодействия с атомом Au (в знаменателе формулы (3) стоит  $n_{Au}\sigma_{Au}$ ), а если частица находится в воде, то на основе сечений взаимодействия с атомами H и O (в знаменателе стоит  $n_H\sigma_H + n_O\sigma_O$ ). Если в результате свободного пробега случайной длины  $s$  частица пересекает границу НЧ, переходя из НЧ в воду или наоборот, то определяется точка пересечения траектории частицы с поверхностью НЧ. Затем из этой точки производится новый шаг в том же направлении, но со случайной длиной  $s'$ , рассчитанной на основе сечений взаимодействия частицы с атомами той области, в которую переходит частица.

В данной работе мы рассматриваем фотоионизацию золотой НЧ фотонами с энергией до 80 кэВ, что меньше потенциала ионизации 1s-оболочки атома золота,  $I_{Au1s} \approx 81$  кэВ. Поэтому наиболее глубокой вакансией, которая может образоваться в атоме



**Рис. 3.** Сечения взаимодействия фотона с молекулой воды. Сплошная линия — полное сечение фотоионизации, рассчитанное в [23] как сумма сечений фотоионизации атомов водорода и кислорода и используемое в настоящей работе. Данные базы NIST SRD 126 [28]: кружки — сечение фотоионизации, штриховая линия — сечение когерентного рассеяния, пунктирная линия — сечение комптоновского рассеяния. Вертикальными пунктирными линиями отмечены пороги ионизации атомов O и H

золота в результате первичной фотоионизации, является вакансия в 2s-подоболочке, потенциал ионизации которой равен  $I_{Au2s} \approx 14.4$  кэВ. Следовательно, максимальная энергия вторичных фотонов, которые образуются в результате распада вакансий в атомах НЧ, не превышает 14.3 кэВ. В этой области энергии как для золота, так и для воды, сечение фотоионизации превосходит сечения когерентного и комптоновского рассеяния фотона на 1–3 порядка. В связи с этим при моделировании распространения вторичных фотонов в зоне взаимодействия мы пренебрегаем когерентным и комптоновским рассеянием и учитываем только процессы фотоионизации. Таким образом, испущенный в ходе распада вакансии фотон либо поглощается одним из атомов внутри зоны взаимодействия (в НЧ или в воде), либо покидает зону. В случае поглощения фотона внутри зоны на основе парциальных сечений фотоионизации с помощью генератора случайных чисел проводится выбор ионизированного атома (O или H при поглощении фотона в воде) и ионизируемой подоболочки. В случае ионизации внутренней подоболочки атомов Au или O запускается описанная выше процедура моделирования каскадной релаксации вакансии, и испускаемые в ходе нее фотоны и/или электроны добавляются в список вторичных частиц для дальнейшего анализа.

Парциальные сечения фотоионизации атомов золота, кислорода и водорода, используемые при моделировании распространения вторичных фотонов, были рассчитаны в дипольном приближении с использованием паули-фоковских волновых функций в работах [6] для Au и [23] для O и H и находятся в хорошем согласии с данными других авторов. Здесь мы приводим рассчитанные с их помощью полное сечение фотоионизации атома золота (рис. 2) и полное сечение фотоионизации молекулы воды (рис. 3), рассчитанное как сумма сечений фотоионизации атомов водорода и кислорода,  $\sigma_{H_2O} = 2\sigma_H + \sigma_O$ , в сравнении с сечениями из базы данных NIST SRD 126 [28] для процессов фотоионизации и для когерентного и комптоновского рассеяния.

При моделировании распространения вторичных электронов учитываются два типа процессов: упругое рассеяние электрона на атоме и ионизация атома электронным ударом. Полное сечение взаимодействия электрона с кинетической энергией  $t$  с атомом  $a$  ( $a = Au, O, H$ ) складывается из сечения упругого рассеяния и сечения ударной ионизации,

$$\sigma_a^{tot}(t) = \sigma_a^{elast}(t) + \sigma_a^{ioniz}(t).$$

Сечение ионизации атома  $a$  электронным ударом, в свою очередь, складывается из парциальных сечений ионизации всех его  $nl$ -подоболочек,

$$\sigma_a^{ioniz}(t) = \sum_{nl} \sigma_{a,nl}^{ioniz}(t).$$

Если в результате свободного пробега со случайной длиной, рассчитанной по формуле (2) с использованием полных сечений  $\sigma_a^{tot}(t)$ , электрон остается в зоне взаимодействия (в НЧ или в воде), то с помощью генератора случайных чисел проводится выбор атома, с которым столкнулся электрон (O или H, если электрон испытал столкновение в воде), а затем выбор типа произошедшего события (упругое рассеяние или ионизация какой-либо подоболочки атома).

В случае выбора упругого рассеяния с помощью дифференциальных по полярному углу рассеяния  $\vartheta$  сечений упругого рассеяния  $d\sigma_a^{elast}(t, \vartheta)/d\vartheta$  случайным образом выбирается новое направление движения электрона.

В случае выбора процесса ионизации  $nl$ -подоболочки атома  $a$  электронным ударом на основе дифференциального по энергии выбитого электрона  $\varepsilon$  сечения ионизации данной подоболочки  $d\sigma_{a,nl}^{ioniz}(t, \varepsilon)/d\varepsilon$  проводится случайный выбор энер-

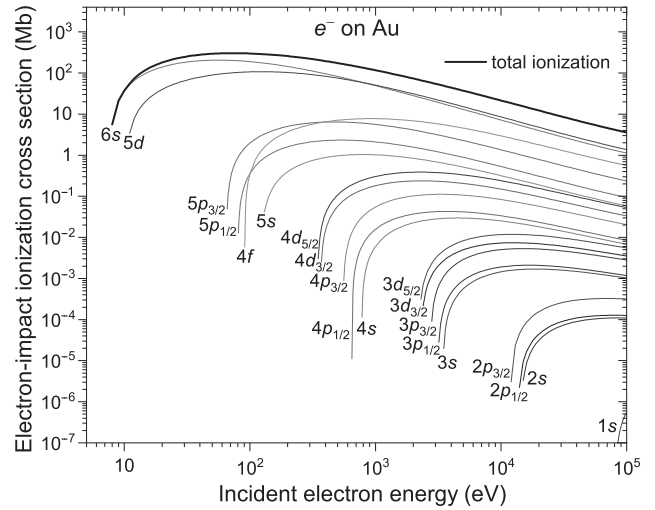


Рис. 4. Парциальные и полное сечения ионизации атома Au электронным ударом, рассчитанные в приближении бинарных столкновений Бете

гии выбитого электрона  $\varepsilon$ , а энергия рассеянного электрона уменьшается:

$$t' = t - I_{a,nl} - \varepsilon,$$

где  $I_{a,nl}$  — потенциал ионизации  $nl$ -подоболочки атома  $a$ . Далее на основе закона сохранения импульса определяются новое направление движения рассеянного электрона и направление движения выбитого электрона. Образовавшаяся в результате ионизации вакансия в  $nl$ -подоболочке атома  $a$  анализируется на возможность ее распада, и если распад возможен, то запускается процедура его моделирования.

Дифференциальные  $d\sigma_a^{elast}(t, \vartheta)/d\vartheta$  и полные  $\sigma_a^{elast}(t)$  сечения упругого рассеяния электрона на атомах Au, O и H при энергии электрона  $t < 50$  эВ были рассчитаны в приближении парциальных волн [29] с использованием радиальных частей волновых функций рассеянного электрона, рассчитанных в приближении Паули–Фока. При энергии электрона  $t > 50$  эВ при моделировании используются сечения упругого рассеяния из электронной базы NIST SRD 64 [30].

Сечения ионизации атомов Au, O и H электронным ударом в ходе моделирования рассчитывались с помощью полуэмпирического приближения бинарных столкновений Бете (binary-encounter Bethe, BEB) [31]. При энергии электрона более 10 кэВ использовалась релятивистская модификация BEB-приближения [32]. Рассчитанные в данном приближении парциальные и полные сечения ионизации атомов электронным ударом представлены на рис. 4

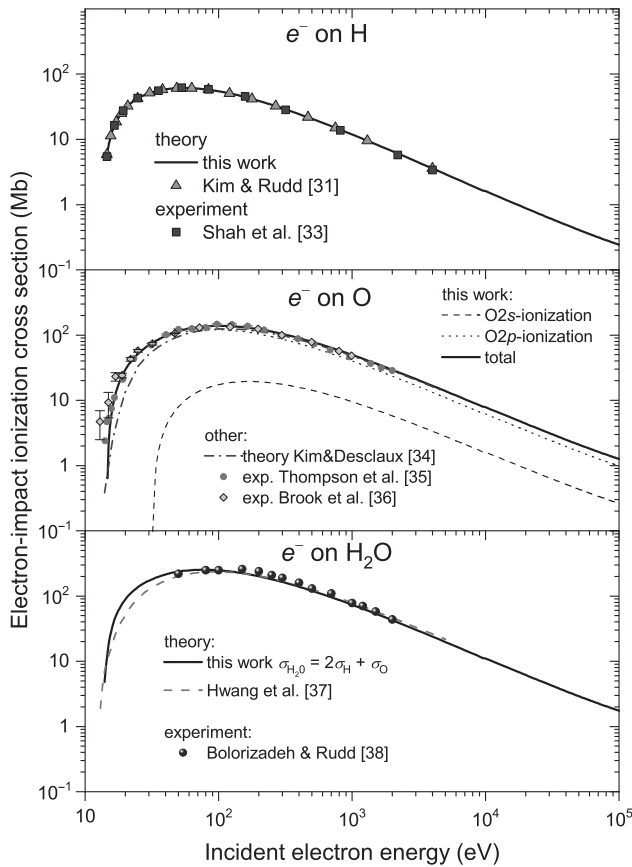


Рис. 5. Сечения ионизации электронным ударом атома H (верхняя панель), атома O (средняя панель) и молекулы воды (нижняя панель)

для атома Au и на рис. 5 для атомов H и O в сравнении с теоретическим и экспериментальными результатами других авторов [31, 33–36]. Также на рис. 5 представлено сечение ионизации электронным ударом молекулы воды, рассчитанное в приближении невзаимодействующих атомов как сумма сечений ионизации отдельных атомов H и O,  $\sigma_{H_2O}^{ioniz} = 2\sigma_H^{ioniz} + \sigma_O^{ioniz}$ . Как можно видеть, полученное таким способом сечение ударной ионизации молекулы H<sub>2</sub>O находится в хорошем согласии с результатами расчета Хвана и др. [37], в котором ВЕВ-приближение [31] было использовано для расчета сечений ионизации молекулярных орбиталей молекулы H<sub>2</sub>O, и с экспериментальными данными Болоризаде и Радда [38].

На рис. 6 представлены средние длины свободного пробега фотонов в твердом золоте и жидкой воде. Сплошными линиями изображены средние длины свободного пробега, рассчитанные только с учетом процессов фотоионизации с помощью используемых при моделировании сечений фотоионизации атомов Au, O и H. Кружками на рис. 6 представлены сред-

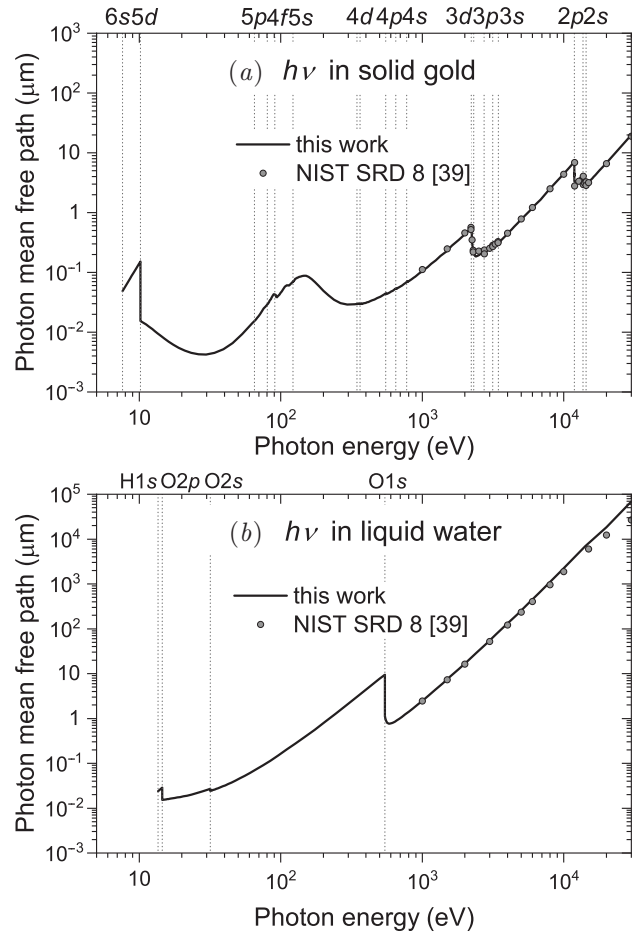


Рис. 6. Средние длины свободного пробега фотонов в твердом золоте (a) и в жидкой воде (b). Сплошные линии — расчет на основе сечений фотоионизации атомов Au [6] и O, H [23], которые используются в данной работе. Кружки — расчет на основе массовых коэффициентов ослабления из базы NIST SRD 8 [39] с учетом когерентного и комптоновского рассеяния

ние длины свободного пробега фотонов, полученные на основе массовых коэффициентов ослабления из базы данных NIST SRD 8 [39] с учетом как процессов фотоионизации, так и процессов когерентного и комптоновского рассеяния фотона. Небольшое отличие наших результатов от данных [39] наблюдается в случае воды (рис. 6b) при энергии фотонов более 15 кэВ, что связано с пренебрежением нами комптоновским рассеянием. Но, как уже было отмечено выше, поскольку при моделировании вторичные фотоны с энергией более 14.3 кэВ не образуются, это не может заметно повлиять на результаты моделирования.

На рис. 7 представлены зависимости средней неупругой (обусловленной процессами ударной ионизации) длины свободного пробега электрона в твердом золоте и жидкой воде от энергии электрона,

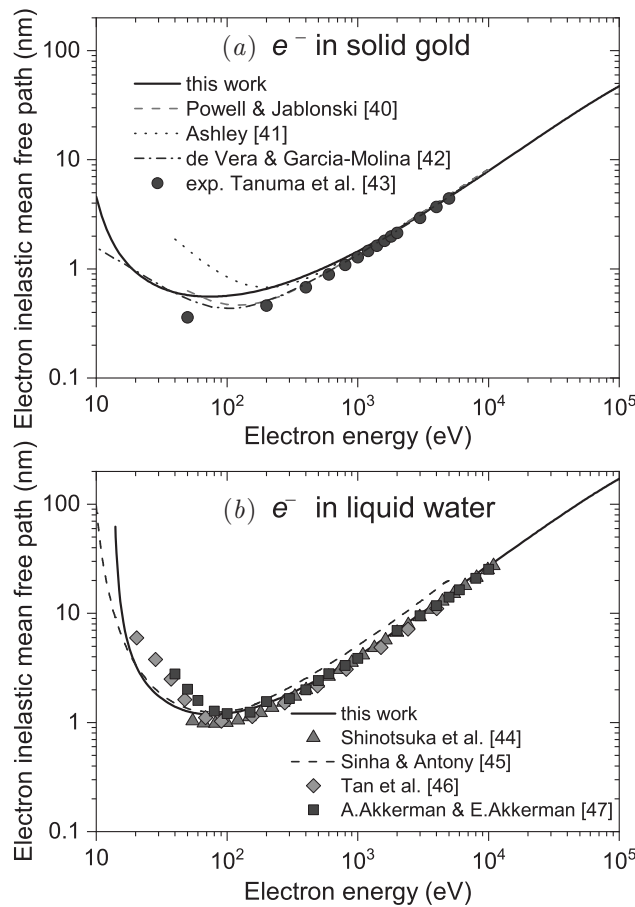


Рис. 7. Средние неупругие длины свободного пробега электрона в твердом золоте (а) и в жидкой воде (б)

рассчитанные с помощью сечений ионизации атомов Au, O и H электронным ударом в ВЕВ-приближении, которые используются при моделировании распространения вторичных электронов. Как для воды, так и для золота наблюдается хорошее согласие с результатами других авторов [40–47].

Моделирование распространения вторичных электронов внутри зоны взаимодействия в рамках одного испытания Монте-Карло продолжается до тех пор, пока каждый электрон не покинет зону, или пока его энергия не станет недостаточной для ионизации атомов H и O (минимальная пороговая энергия для электронов равна потенциалу ионизации атома водорода  $I_{H1s} = 13.6$  эВ). После проведения большого количества испытаний (в данной работе каждый эксперимент Монте-Карло состоял из  $10^5$  испытаний) рассчитываемые характеристики усредняются по всем испытаниям, т.е. представляют собой средние значения, приходящиеся на один поглощенный НЧ первичный фотон.

### 2.3. Рассчитываемые характеристики

В результате моделирования рассчитываются спектры фотонов и электронов, испускаемых золотой НЧ в окружающую водную среду. Шкала энергии при этом разбивается на одинаковые интервалы шириной 10 эВ, для каждого из которых в результате моделирования определяется среднее число частиц (фотонов или электронов) с энергией внутри данного интервала, испускаемых НЧ в результате одного акта первичной фотоионизации.

Для исследования пространственного распределения актов вторичной ионизации, происходящих внутри зоны взаимодействия, и поглощенной в этих актах энергии сферическая зона взаимодействия разбивается на концентрические шаровые слои толщиной  $\Delta r = 1$  нм с центром, совпадающим с центром зоны и центром НЧ, см. рис. 1. В результате моделирования для каждого  $i$ -го шарового слоя, ограниченного сферами с радиусами  $r_i - \Delta r/2$  и  $r_i + \Delta r/2$ , определяются среднее число происходящих в них актов вторичной ионизации атомов электронным ударом  $\Delta N_{ioniz}^{el}(r_i)$  и среднее число актов вторичной фотоионизации  $\Delta N_{ioniz}^{phot}(r_i)$ .

В результате каждого акта ионизации ионизированный атом поглощает определенную энергию. Энергия, поглощенная атомом в результате акта ионизации и последующего распада образовавшейся вакансии (в случае ионизации одной из внутренних оболочек атома), рассчитывается как разность потенциала ионизации ионизированной подоболочки и суммарной энергии всех испущенных в ходе распада вакансии фотонов и/или электронов. При моделировании для каждого  $i$ -го шарового слоя определяются средние энергии, поглощенные находящимися в нем атомами в результате актов ионизации электронным ударом  $\Delta E_{abs}^{el}(r_i)$  и актов фотоионизации  $\Delta E_{abs}^{phot}(r_i)$ .

Зависимость локальной поглощенной дозы в воде от расстояния от центра НЧ рассчитывается как

$$D(r_i) = \frac{\Delta E_{abs}^{el+phot}(r_i)}{\rho \Delta V(r_i)}, \quad (4)$$

где

$$\Delta E_{abs}^{el+phot}(r_i) = \Delta E_{abs}^{el}(r_i) + \Delta E_{abs}^{phot}(r_i)$$

— суммарная энергия, поглощенная внутри  $i$ -го шарового слоя в результате актов вторичной ионизации атомов электронным ударом и вторичной фотоионизации,  $\rho \Delta V(r_i)$  — масса  $i$ -го шарового слоя,  $\rho$  — плотность воды,  $\Delta V(r_i)$  — объем шарового слоя.

Кроме  $\Delta N_{ioniz}^{el}(r_i)$  и  $\Delta N_{ioniz}^{phot}(r_i)$  для отдельных слоев воды, рассчитываются также число актов вторичной ионизации воды электронным ударом

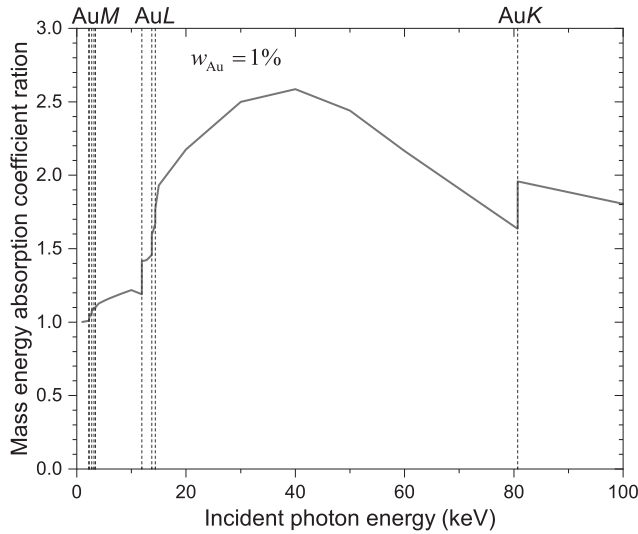


Рис. 8. Зависимость отношения массовых коэффициентов поглощения энергии в воде с золотыми НЧ и в чистой воде (б) от энергии падающих фотонов при относительном массовом содержании золота 1 %

$N_{ioniz}^{el}(r)$  и число актов вторичной фотоионизации  $N_{ioniz}^{phot}(r)$ , происходящих внутри сферы радиусом  $r$ , и поглощенные при этом энергии  $E_{abs}^{el}(r)$  и  $E_{abs}^{phot}(r)$ :

$$\begin{aligned} N_{ioniz}^{el}(r) &= \sum_{R_{NP} < r_i \leq r} \Delta N_{ioniz}^{el}(r_i), \\ E_{abs}^{el}(r) &= \sum_{R_{NP} < r_i \leq r} \Delta E_{abs}^{el}(r_i), \\ N_{ioniz}^{phot}(r) &= \sum_{R_{NP} < r_i \leq r} \Delta N_{ioniz}^{phot}(r_i), \\ E_{abs}^{phot}(r) &= \sum_{R_{NP} < r_i \leq r} \Delta E_{abs}^{phot}(r_i), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $R_{NP}$  — радиус НЧ.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

При использовании золотых НЧ в качестве радиосенсибилизаторов в фотонной терапии одним из важных вопросов является выбор энергии падающих фотонов, при которой достигается максимальное увеличение поглощенной дозы внутри опухоли. Для выбора оптимальной энергии падающих фотонов в первом приближении можно использовать отношение массовых коэффициентов поглощения энергии в воде, содержащей золотые НЧ, и в чистой воде:

$$k(h\nu) = \frac{w_{Au} \mu_{en}^{Au}(h\nu) + (1 - w_{Au}) \mu_{en}^{H_2O}(h\nu)}{\mu_{en}^{H_2O}(h\nu)}, \quad (6)$$

где  $\mu_{en}^{H_2O}$  и  $\mu_{en}^{Au}$  — массовые коэффициенты поглощения энергии в воде и в золоте ( $\mu_{en}$  представляет собой относительную часть энергии фотона, которая

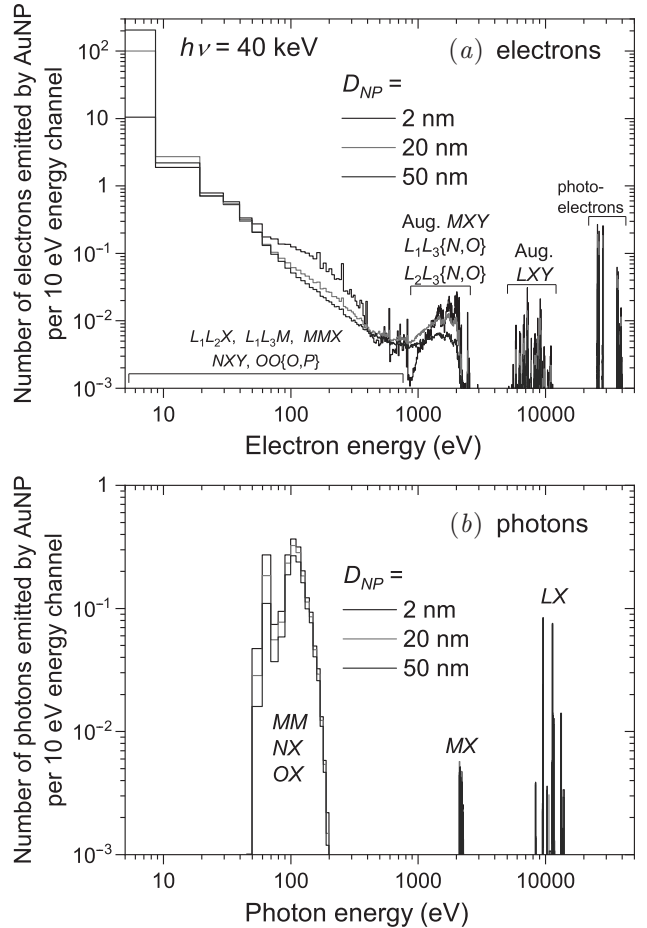


Рис. 9. Рассчитанные спектры электронов (а) и фотонов (б), испускаемых золотыми наночастицами с диаметрами 2, 20 и 50 нм в результате поглощения фотона с энергией 40 кэВ

переходит в энергию заряженных частиц в процессах взаимодействия падающего фотона и вторичных частиц с атомами вещества в слое с единичной массой на единицу площади [48]), а  $w_{Au}$  — относительное массовое содержание золота в воде. На рис. 8 представлена зависимость коэффициента  $k$  от энергии падающих фотонов  $h\nu$ , рассчитанная с помощью массовых коэффициентов поглощения энергии из базы данных NIST SRD 126 [28], при  $w_{Au} = 1\%$ . Как можно видеть, наибольшее значение коэффициента увеличения поглощения  $k$  достигается при энергии фотонов  $\approx 40$  кэВ и составляет около 2.6.

С помощью метода, описанного в разд. 2, было проведено Монте-Карло-моделирование процессов, происходящих в результате поглощения золотыми НЧ различного диаметра (от 2 до 100 нм) одного фотона с энергией 40 кэВ.

На рис. 9 представлены спектры вторичных электронов и фотонов, испускаемых золотыми наночастицами диаметрами 2, 20 и 50 нм после поглоще-

Таблица 1. Средние значения различных интегральных характеристик при поглощении золотыми наночастицами различного диаметра фотона с энергией 40 кэВ

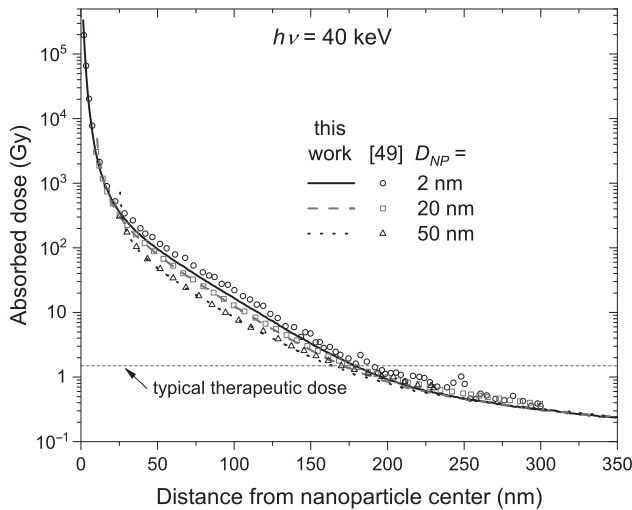
Рассчитываемая величина	Диаметр наночастицы, нм				
	2	10	20	50	100
Энергия, поглощенная НЧ, кэВ	0.64	1.00	1.42	2.36	3.16
Количество фотонов, испускаемых НЧ	2.28	2.04	1.77	1.29	0.87
Энергия, переизлучаемая НЧ вместе с фотонами, кэВ	3.32	3.26	3.27	3.24	3.20
Количество электронов, испускаемых НЧ, с энергией, достаточной для ионизации молекул воды	6.71	4.30	2.94	1.23	0.32
Энергия, переизлучаемая НЧ вместе с электронами, способными ионизировать молекулы воды, кэВ	35.99	35.56	34.99	33.84	32.88
Количество низкоэнергетических электронов, испускаемых НЧ, энергия которых недостаточна для ионизации молекул воды	11.4	54.4	102	206	294
Энергия, переизлучаемая НЧ вместе с низкоэнергетическими электронами, неспособными ионизировать молекулы воды, кэВ	0.05	0.18	0.31	0.56	0.76
Энергия, поглощенная в воде в результате актов вторичной фотоионизации, кэВ	2.15	2.12	2.09	2.02	1.96
Энергия, поглощенная в воде в результате актов вторичной ионизации электронным ударом, кэВ	26.03	25.71	25.30	24.45	23.74
Число образовавшихся в зоне взаимодействия низкоэнергетических электронов с энергией, недостаточной для ионизации молекул воды	2007	2023	2039	2076	2108
Энергия образовавшихся в зоне взаимодействия низкоэнергетических электронов, кэВ	8.27	8.30	8.29	8.26	8.23

ния фотона с энергией 40 кэВ. В спектре электронов (рис. 9а) с низкоэнергетической стороны каждой диаграммной линии, соответствующей фото- или оже-электрону, имеется «хвост», обусловленный потерями энергии фото- и оже-электронами внутри НЧ в результате вторичных неупругих процессов. С увеличением диаметра НЧ возрастает среднее число актов неупругого рассеяния, испытываемых фото- и оже-электронами внутри НЧ до момента вылета из нее, в результате чего интенсивность диаграммных линий уменьшается, а площадь под непрерывным «хвостом» с низкоэнергетической стороны увеличивается.

В спектре фотонов (рис. 9б) с увеличением диаметра НЧ наблюдается заметное уменьшение интенсивности лишь в низкоэнергетической области спектра, от 50 до 200 эВ. В этой области энергии средняя длина свободного пробега фотонов в твердом золоте (рис. 6а) изменяется в диапазоне от 9 до 88 нм, поэтому вероятность поглощения фотонов такой энергии внутри золотой НЧ с диаметром

в несколько десятков нанометров достаточно велика. В высокоэнергетической области спектра, 8.4–13.8 кэВ, средняя длина свободного пробега фотонов в золоте находится в диапазоне 2.9–7.1 мкм, что во много раз превышает размеры НЧ. Поэтому интенсивность спектра фотонов в этой области энергии практически не зависит от диаметра НЧ.

В табл. 1 представлены результаты расчета средних значений различных интегральных характеристик при энергии первичных фотонов 40 кэВ в зависимости от диаметра золотой НЧ. С увеличением диаметра НЧ от 2 до 100 нм поглощенная НЧ энергия возрастает от 0.64 до 3.16 кэВ. Большая часть энергии поглощенного фотона переизлучается НЧ вместе с электронами, энергия которых достаточна для ионизации окружающих НЧ молекул воды. При этом с ростом диаметра НЧ за счет увеличения числа происходящих внутри НЧ актов неупругого рассеяния электронов наблюдается уменьшение среднего числа таких электронов от 6.71 при  $D_{NP} = 2$  нм до 0.32 при  $D_{NP} = 100$  нм и их средней суммарной

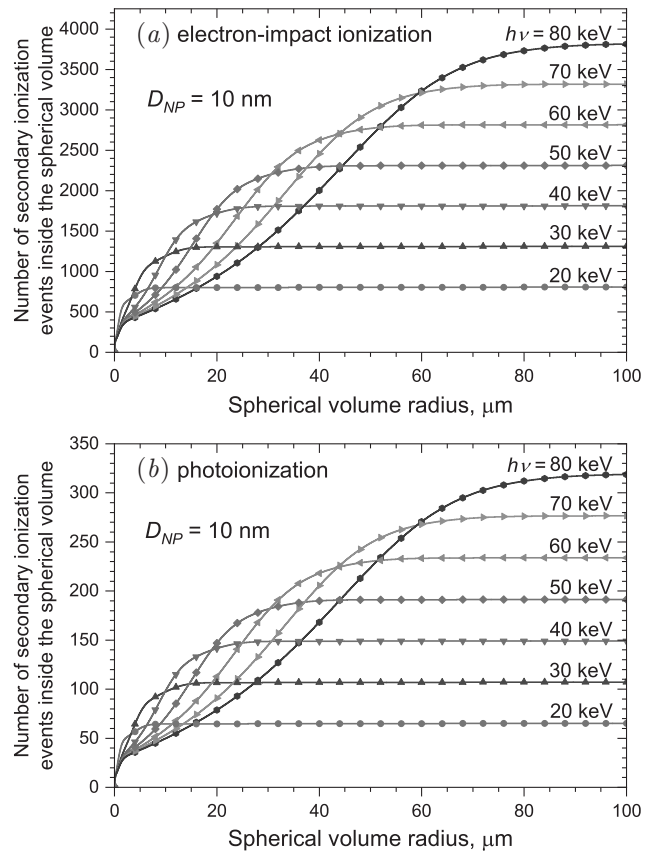


**Рис. 10.** Зависимости локальной поглощенной дозы в воде вблизи поверхности золотых НЧ диаметрами 2, 20 и 50 нм при поглощении фотона с энергией 40 кэВ. Линии — расчет данной работы, символы — результаты моделирования [49] методом Монте-Карло с использованием кода Geant4-DNA

энергии, соответственно, от 35.99 до 32.88 кэВ. По той же причине с увеличением диаметра НЧ возрастает количество испускаемых ею низкоэнергетических электронов, неспособных ионизировать молекулы воды.

На рис. 10 представлены рассчитанные радиальные распределения поглощенной дозы в воде (4) вблизи поверхности золотых НЧ диаметрами 2, 20 и 50 нм при поглощении НЧ одного фотона с энергией 40 кэВ. Наибольшее значение локальной поглощенной дозы наблюдается в непосредственной близости к поверхности НЧ. С увеличением расстояния от центра НЧ поглощенная доза достаточно быстро уменьшается, оставаясь, однако, вплоть до расстояний 160–180 нм больше типичного терапевтического значения. С увеличением диаметра НЧ поглощенная вблизи ее поверхности доза уменьшается, но на расстояниях от центра НЧ более 200 нм радиальные распределения поглощенной дозы для НЧ различного диаметра становятся практически одинаковыми. Вместе с результатами данной работы символами на рис. 10 представлены результаты моделирования Монте-Карло [49] с помощью программного комплекса Geant4-DNA [8]. В случае НЧ диаметрами 20 и 50 нм наши результаты находятся в хорошем согласии с [49]. Однако для НЧ диаметром 2 нм на расстояниях от ее центра более 20 нм результаты нашего расчета в среднем на 20% меньше, чем [49].

Из приведенных выше результатов следует, что при одинаковом массовом содержании наночастиц



**Рис. 11.** Зависимости числа актов вторичной ионизации воды электронным ударом (a) и числа актов вторичной фотоионизации (b) от радиуса сферы, внутри которой они происходят, при различных энергиях первичного фотона, поглощаемого золотой НЧ диаметром 10 нм

внутри опухолевой ткани для достижения наибольшего числа испускаемых ими вторичных электронов, способных ионизировать молекулы воды, и наибольшего значения поглощенной вокруг НЧ дозы следует использовать НЧ небольших размеров.

Для исследования зависимости рассмотренных выше характеристик от энергии первичных фотонов было проведено моделирование для НЧ диаметром 10 нм при энергиях первичных фотонов от 20 до 80 кэВ (между порогами  $I_{Au2s} = 14.4$  кэВ и  $I_{Au1s} = 81$  кэВ).

На рис. 11 представлены числа актов вторичной ионизации молекул воды электронным ударом  $N_{ioniz}^{el}(r)$  (рис. 11a) и вторичной фотоионизации  $N_{ioniz}^{phot}(r)$  (рис. 11b) в зависимости от радиуса сферы  $r$ , внутри которой они происходят (5), при различных энергиях фотонов, ионизирующих золотую НЧ диаметром 10 нм. С увеличением радиуса сферы  $r$  количества актов вторичной ионизации  $N_{ioniz}^{el}(r)$  и  $N_{ioniz}^{phot}(r)$  возрастают, достигая насыще-

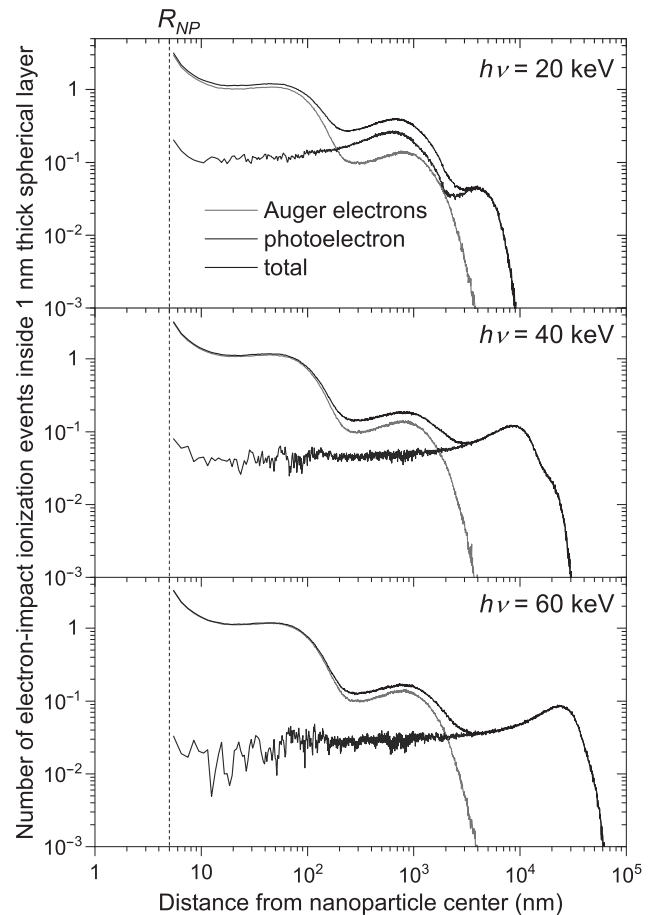
**Таблица 2.** Радиусы сферических областей  $R_{sat}^{el}$  и  $R_{sat}^{phot}$ , внутри которых число актов вторичной ионизации электронным ударом и число актов вторичной фотоионизации достигают насыщения, числа актов ионизации  $N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})$  и  $N_{ioniz}^{phot}(R_{sat}^{phot})$  и поглощенные в результате них энергии  $E_{abs}^{el}(R_{sat}^{el})$  и  $E_{abs}^{phot}(R_{sat}^{phot})$  при различных энергиях первичных фотонов  $h\nu$ , ионизирующих золотую НЧ диаметром 10 нм

$h\nu$ , кэВ	$R_{sat}^{el}$ , МКМ	$N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})$	$E_{abs}^{el}(R_{sat}^{el})$ , кэВ	$R_{sat}^{phot}$ , МКМ	$N_{ioniz}^{phot}(R_{sat}^{phot})$	$E_{abs}^{phot}(R_{sat}^{phot})$ , кэВ
20	5.71	767	10.86	5.70	62	0.88
30	12.00	1245	17.65	11.99	102	1.45
40	20.17	1722	24.42	20.14	142	2.02
50	30.24	2197	31.16	30.18	182	2.59
60	42.36	2674	37.95	42.28	222	3.16
70	56.23	3152	44.73	56.12	263	3.74
80	72.22	3623	51.43	72.10	303	4.31

ния. В табл. 2 приведены радиусы сферических областей  $R_{sat}^{el}$  и  $R_{sat}^{phot}$ , внутри которых происходит 95% от максимального числа актов вторичной ионизации электронным ударом и фотоионизации, количества актов вторичной ионизации в этих областях  $N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})$  и  $N_{ioniz}^{phot}(R_{sat}^{phot})$ , а также поглощаемые при этом энергии  $E_{abs}^{el}(R_{sat}^{el})$  и  $E_{abs}^{phot}(R_{sat}^{phot})$ .

Возрастание числа актов ионизации воды электронным ударом  $N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})$  и радиуса  $R_{sat}^{el}$  области, в которой они происходят, при увеличении энергии ионизирующих НЧ фотонов обусловлено возрастанием энергии фотоэлектрона, образующегося в результате первичной фотоионизации одного из атомов НЧ. В каждом акте вторичной ионизации атомов О и Н молекул воды электронным ударом фотоэлектрон теряет лишь малую часть своей энергии. Поэтому с увеличением энергии фотоэлектрона увеличивается число актов вторичной ионизации, которые он может произвести до своего торможения, т. е. до того момента, когда его энергия станет недостаточной для ионизации молекул воды. В результате этого, а также в результате увеличения средней неупругой длины свободного пробега электрона в воде (рис. 7b) увеличивается среднее расстояние, на которое фотоэлектрон может уйти от НЧ до момента своего торможения.

Для иллюстрации этого мы провели дополнительное моделирование, в котором не учитывали фотоэлектрон, образующийся при первичной фотоионизации НЧ. Это позволило разделить вклады испускаемых НЧ фото- и оже-электронов в общее число актов вторичной фотоионизации. На рис. 12 представлены зависимости чисел актов вторичной ионизации воды  $\Delta N_{ioniz}^{el}(r)$  внутри шаровых слоев толщиной  $\Delta r = 1$  нм, индуцированных фото- и оже-электронами, при различных энергиях первич-



**Рис. 12.** Числа актов вторичной ионизации воды электронным ударом внутри шаровых слоев толщиной  $\Delta r = 1$  нм в зависимости от расстояния от центра НЧ при различных значениях энергии первичных фотонов, ионизирующих золотую НЧ диаметром 10 нм

ных фотонов. Как можно видеть, вблизи поверхности НЧ наибольший вклад в количество процессов



ионизации вносят испускаемые НЧ оже-электроны, а вдали от НЧ — фотоэлектрон. При этом с увеличением энергии первичных фотонов интервал расстояний, на котором вклад фотоэлектрона преобладает, становится шире и смещается дальше от центра НЧ.

При рассматриваемых нами энергиях первичных фотонов  $I_{Au2s} < h\nu < I_{Au1s}$  основными процессами первичной фотоионизации атомов НЧ являются процессы ионизации  $2s$ -,  $2p_{1/2}$ - и  $2p_{3/2}$ -подоболочек атома Au, поэтому испускаемые НЧ оже-электроны образуются преимущественно в результате каскадных распадов данных начальных вакансий. С увеличением энергии первичных фотонов в диапазоне от 20 до 80 кэВ относительная вероятность фотоионизации  $2s$ -подоболочки атома Au возрастает от 0.18 до 0.38, а относительные вероятности фотоионизации  $2p_{1/2}$ - и  $2p_{3/2}$ -подоболочек уменьшаются от 0.24 до 0.19 и от 0.34 до 0.20 соответственно. В результате этого спектр испускаемых НЧ оже-электронов изменяется, увеличивается среднее число испускаемых оже-электронов и средняя уносимая ими энергия [6]. Данные изменения приводят к относительно небольшому увеличению числа производимых оже-электронами актов вторичной ионизации воды, но, как можно видеть на рис. 12, практически не сказываются на их пространственном распределении.

Что касается актов вторичной фотоионизации воды, то основным их источником являются не фотоны, испускаемые НЧ, а вторичные фотоны, образующиеся в воде в результате радиационных  $L_1L_{23}$ -переходов в атомах кислорода, ионизированных электронным ударом. Энергия  $OL_1L_{23}$ -фотона равна 17.2 эВ, что достаточно для ионизации атома водорода и  $2p$ -подоболочки атома кислорода. Средняя длина свободного пробега фотона с такой энергией в воде равна примерно 16.6 нм (рис. 6b), поэтому он с большой вероятностью будет поглощен недалеко от атома, которым был испущен, а число актов вторичной фотоионизации, производимых  $OL_1L_{23}$ -фотонами, будет равно количеству актов ионизации  $2s$ -подоболочки атомов кислорода электронным ударом [23]. В связи с этим представленные на рис. 11b зависимости чисел актов вторичной фотоионизации  $N_{ioniz}^{phot}(r)$  от радиуса сферы, внутри которой они происходят, практически повторяют по форме соответствующие тем же значениям энергии первичных фотонов зависимости чисел актов вторичной ионизации электронным ударом  $N_{ioniz}^{el}(r)$  (рис. 11a). Поэтому радиусы сферических областей  $R_{sat}^{el}$  и  $R_{sat}^{phot}$  (табл. 2) практически совпадают, а отношение числа происходящих в них актов вторичной ионизации электронным ударом к числу актов вторичной фо-

тоионизации не зависит от энергии первичных фотонов и равно

$$N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})/N_{ioniz}^{phot}(R_{sat}^{phot}) \approx 12.$$

Необходимо, однако, отметить, что в спектре испускаемых золотыми НЧ фотонов (рис. 9b) имеются фотоны, испускаемые в результате радиационных  $LX$ -переходов при распаде вакансий в  $L$ -оболочке первоначально ионизированных атомов золота. Среднее число этих фотонов на одну первичную фотоионизацию составляет около 0.28, а средняя энергия, приходящаяся на один фотон, 10.7 кэВ. При этой энергии средняя длина свободного пробега фотонов в воде (рис. 6b) приблизительно равна 2.9 мм, что существенно больше радиуса зоны взаимодействия  $R_{zone} = 0.1$  мм, поэтому данные фотоны с большой вероятностью покидают зону взаимодействия.

Отметим, что представленные выше результаты получены в расчете на один поглощенный наночастицей первичный фотон и соответствуют процессам, происходящим в масштабах всего одной или нескольких клеток. Но в приложении к фотонной терапии важен также вопрос о величине поглощенной дозы на более крупном масштабе — о величине дозы, поглощенной внутри целой опухоли, при заданных ее размерах, глубине расположения, концентрации введенных в нее НЧ и характеристиках падающего рентгеновского пучка. Расчеты подобного рода методом Монте-Карло были проведены в работах [50, 51].

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные в данной работе результаты могут быть полезны при разработке методов фотонной терапии с использованием золотых НЧ в качестве радиосенсибилизаторов. Из приведенных результатов следует, что в случае целевой доставки НЧ непосредственно в ядра раковых клеток для достижения максимального радиационного повреждения вблизи поверхностей НЧ выгоднее использовать НЧ небольшого диаметра. При выборе же энергии первичных фотонов наряду с традиционным требованием достижения максимального увеличения поглощенной дозы внутри опухоли необходимо учитывать пространственное распределение производимых фотоэлектронами актов вторичной ионизации вблизи поверхности НЧ (рис. 12). Например, имеет смысл выбирать энергию первичных фотонов немного больше порога ионизации  $L_1$ -оболочки атома Au, чтобы области ионизационных повреждений, производимых фото- и оже-электронами, совпадали.

**Финансирование.** Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-72-00042), <https://rscf.ru/project/22-72-00042/>.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Liu, P. Zhang, F. Li, X. Jin, J. Li, W. Chen, and Q. Li, *Theranostics* **8**, 1824 (2018); <https://doi.org/10.7150/thno.22172>.
2. Z. Kuncic and S. Lacombe, *Phys. Med. Biol.* **63**, 02TR01 (2018); <https://doi.org/10.1088/1361-6560/aa99ce>.
3. Ю. А. Финогенова, А. А. Липенгольц, В. А. Скрибицкий, К. Е. Шпакова, А. В. Смирнова, А. В. Скрибицкая, Н. Н. Сычева, Е. Ю. Григорьева, *Медицинская физика* **3**, 70 (2023); <https://doi.org/10.52775/1810-200X-2023-99-3-70-86>.
4. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **286**, 108200 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2022.108200>.
5. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **310**, 108714 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108714>.
6. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **302**, 108561 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108561>.
7. F. Moradi, K. Rezaee Ebrahim Saraee, S. F. Abdul Sani, and D. A. Bradley, *Radiat. Phys. Chem.* **180**, 109294 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.109294>.
8. S. Incerti et al., *Int. J. Model. Simul. Sci. Comput.* **1**, 157 (2010); <https://doi.org/10.1142/S1793962310001022>.
9. A. Taheri, M. U. Khandaker, F. Moradi, and D. A. Bradley, *Radiat. Phys. Chem.* **212**, 111146 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2023.111146>.
10. J. M. Fernandez-Varea, G. Gonzalez-Munoz, M. E. Galfassi, K. Wiklund, B. K. Lind, A. Ahnesjo, and N. Tilly, *Int. J. Radiat. Biol.* **88**, 66 (2012); <https://doi.org/10.3109/09553002.2011.598209>.
11. S. T. Perkins, D. E. Cullen, and M. H. Chen, J. Rathkopf, J. Scofield, and J. H. Hubbell, *Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the Llnl Evaluated Atomic Data Library (Eadl), Z = 1-100*, Technical Report UCRL-50400, Vol. 30 (1991).
12. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *Opt. Spectrosc.* **131**, 529 (2023); <http://dx.doi.org/10.61011/EOS.2023.04.56366.4560-22>.
13. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, I. D. Petrov, and V. A. Yavna, *Phys. Scr.* **98**, 025406 (2023); <https://doi.org/10.1088/1402-4896/acb407>.
14. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *Phys. Scr.* **98**, 095402 (2023); <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aceae6>.
15. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, and A. I. Dudenko, *Phys. Scr.* **99**, 045407 (2024); <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad3157>.
16. A. G. Kochur, A. I. Dudenko, V. L. Sukhorukov, and I. D. Petrov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 1709 (1994); <https://doi.org/10.1088/0953-4075/27/9/011>.
17. A. G. Kochur, V. L. Sukhorukov, A. J. Dudenko, and P. V. Demekhin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 387 (1995); <https://doi.org/10.1088/0953-4075/28/3/010>.
18. S. Kucas and R. Karazija, *Phys. Scr.* **47**, 754 (1993); <https://doi.org/10.1088/0031-8949/47/6/012>.
19. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, *Phys. Scr.* **98**, 095406 (2023); <https://doi.org/10.1088/1402-4896/acef6e>.
20. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, *Eur. Phys. J. D* **73**, 80 (2019); <https://doi.org/10.1140/epjd/e2019-90185-2>.
21. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenomena* **238**, 146863 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2019.05.012>.
22. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, and V. A. Yavna, *Radiat. Eff. Defects Solids* **177**, 814 (2022); <https://doi.org/10.1080/10420150.2022.2082296>.
23. А. П. Чайников, А. Г. Кочур, А. И. Дуденко, *ЖЭТФ* **164**, 927 (2023); <https://doi.org/10.31857/S0044451023120076>.
24. I. I. Fabrikant, S. Eden, N. J. Mason, and J. Fedor, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **66**, 545 (2017); <https://doi.org/10.1016/bs.aamop.2017.02.002>.
25. R. Kau, I. D. Petrov, V. L. Sukhorukov, and H. Hopt, *Z. Phys. D Atom., Mol. Clust.* **39**, 267 (1997); <https://doi.org/10.1007/s004600050137>.
26. V. L. Sukhorukov, I. D. Petrov, B. M. Lagutin, A. Ehresmann, K.-H. Schartner, and H. Schmoranzner, *Phys. Rep.* **786**, 1 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2018.10.004>.

27. А. Ф. Аккерман, *Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
28. J. H. Hubbell and S. M. Seltzer, *X-Ray Mass Attenuation Coefficients, NIST Standard Reference Database 126*, NIST, PML, Radiation Physics Division (2004); <https://dx.doi.org/10.18434/T4D01F>.
29. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, Москва (1977) [ I. I. Sobelman, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Elsevier (1972); <https://doi.org/10.1016/C2013-0-02394-8>].
30. A. Jablonski, F. Salvat, and C. J. Powell, *NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database, Version 3.2*, NIST, Gaithersburg, MD (2010); <https://dx.doi.org/10.18434/T4NK50>.
31. Y.-K. Kim and M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* **50**, 3954 (1994); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.50.3954>.
32. Y.-K. Kim, J. P. Santos, and F. Parente, *Phys. Rev. A* **62**, 052710 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.052710>.
33. M. B. Shah, D. S. Elliott, and H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 3501 (1987); <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/20/14/022>.
34. Y.-K. Kim and J.-P. Desclaux, *Phys. Rev. A* **66**, 012708 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.012708>.
35. W. R. Thompson, M. B. Shah, and H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 1321 (1995); <https://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/28/7/023>.
36. E. Brook, M. F. A. Harrison, and A. C. H. Smith, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11**, 3115 (1978); <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/11/17/021>.
37. W. Hwang, Y.-K. Kim, and M. E. Rudd, *J. Chem. Phys.* **104**, 2956 (1996); <http://dx.doi.org/10.1063/1.471116>.
38. M. A. Bolorizadeh and M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* **33**, 882 (1986); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.33.882>.
39. M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, D. S. Zucker, and K. Olsen, *NIST Standard Reference Database 8 (XGAM)*, NIST, PML, Radiation Physics Division (2010); <https://dx.doi.org/10.18434/T48G6X>.
40. C. J. Powell and A. Jablonski, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **28**, 19 (1999); <https://doi.org/10.1063/1.556035>.
41. J. C. Ashley, *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena* **50**, 323 (1990); [https://doi.org/10.1016/0368-2048\(90\)87075-Y](https://doi.org/10.1016/0368-2048(90)87075-Y).
42. P. de Vera and R. Garcia-Molina, *J. Phys. Chem. C* **123**, 2075 (2019); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b10832>.
43. S. Tanuma, S. Ichimura, K. Goto, and T. Kimura, *J. Surf. Analysis* **9**, 285 (2002); <https://doi.org/10.1384/jsa.9.285>.
44. H. Shinotsuka, S. Tanuma, and C. Powell, *Surf. Interface Analysis* **54**, 534 (2022); <https://doi.org/10.1002/sia.7064>.
45. N. Sinha and B. Antony, *J. Phys. Chem. B* **125**, 5479 (2021); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c10781>.
46. Z. Tan, Y. Xia, M. Zhao, and X. Liu, *Radiat. Environ. Biophys.* **45**, 135 (2006); <https://doi.org/10.1007/s00411-006-0049-0>.
47. A. Akkerman and E. Akkerman, *J. Appl. Phys.* **86**, 5809 (1999); <https://doi.org/10.1063/1.371597>.
48. J. H. Hubbell, *Int. J. Appl. Radiat. Isot.* **33**, 1269 (1982); [https://doi.org/10.1016/0020-708X\(82\)90248-4](https://doi.org/10.1016/0020-708X(82)90248-4).
49. S. J. McMahon et al., *Sci. Rep.* **1**, 18 (2011); <https://doi.org/10.1038/srep00018>.
50. И. В. Щегольков, И. Н. Шейно, В. Ф. Хохлов, А. А. Липенгольц, *Медицинская физика* **4**, 12 (2010).
51. И. А. Конобеев, Ю. А. Кураченко, И. Н. Шейно, *Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика* **1**, 155 (2019); <https://doi.org/10.26583/npe.2019.1.14>.

# ПРОЦЕСС РАСЩЕПЛЕНИЯ ФОТОНА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПОЗИТРОНИЯ

Д. А. Румянцев <sup>a\*</sup>, Д. М. Шленев <sup>b\*\*</sup>, М. В. Чистяков <sup>a\*\*\*</sup>

<sup>a</sup> Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова  
150000, Ярославль, Россия

<sup>b</sup> Ярославское высшее военное училище противовоздушной обороны  
150001, Ярославль, Россия

Поступила в редакцию 12 апреля 2024 г.,  
после переработки 12 апреля 2024 г.  
Принята к публикации 2 мая 2024 г.

Рассмотрен процесс расщепления фотона  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  в сильном магнитном поле с учетом вклада позитрония в дисперсию фотона. Показано, что наличие таких условий приводит к открытию нового канала реакции и изменению правил отбора по поляризациям фотонов. Вычислены соответствующие парциальные вероятности для разрешенных каналов. Получена оценка эффективности рассматриваемого процесса.

DOI: 10.31857/S0044451024080066

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс расщепления фотона  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ , запрещенный в вакууме законом сохранения зарядовой четности, известным как теорема Фарри, становится разрешенным в присутствии внешнего поля и/или плазмы, меняющих как амплитуду взаимодействия, так и дисперсионные свойства фотонов. Несмотря на длительную историю исследований, интерес к этому процессу не утихает до сих пор в связи с его возможными астрофизическими приложениями.

По-видимому, впервые вероятность расщепления фотона в слабом магнитном поле ( $B \ll B_e = m^2/e \simeq 4.41 \cdot 10^{13} \text{ Гс}^1$ ) и при малых энергиях фотона ( $\omega \ll m$ ) была вычислена в работах [1, 2]. В более детальном исследовании [3] получены правила отбора по поляризациям и показано, что в пределе коллинеарной кинематики будет только один канал расщепления из двух возможных. В той же работе вычислена амплитуда расщепления фотона при энергии начального фотона меньше порога рождения электрон-позитронной

пары ( $\omega \leq 2m$ ) для магнитного поля произвольной напряженности.

Одно из проявлений данного процесса в астрофизике заключается в объяснении смягчения спектров излучения от замагниченных нейтронных звезд. В частности, предполагается, что с его помощью можно установить природу особенностей спектров гамма-излучения некоторых радиопульсаров [4]. В работах [5, 6] были предложены модели, объясняющие обрезание спектров источников мягких повторяющихся гамма-всплесков за счет влияния процесса  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ .

Еще одним интересным приложением рассматриваемого процесса является объяснение особенностей радиоизлучения аномальных рентгеновских пульсаров и источников мягких повторяющихся гамма-всплесков. Поскольку у реакции расщепления фотона нет кинематического порога, энергичные фотоны, распространяющиеся под малыми углами по отношению к магнитному полю, могут расщепляться прежде, чем достигнут порога рождения пары. Таким образом процесс может изменять эффективность производства электрон-позитронной плазмы, необходимой для создания наблюдаемого радиоизлучения [7–9].

Расщепление фотона также должно учитываться в моделях вспышечной активности у источников мягких повторяющихся гамма-всплесков [5, 10]. Рассматриваемый процесс может играть роль регулято-

\* E-mail: rda@uniyar.ac.ru

\*\* E-mail: allen\_caleb@rambler.ru

\*\*\* E-mail: mch@uniyar.ac.ru

<sup>1</sup>) В работе используется естественная система единиц:  $c = \hbar = k = 1$ ,  $m$  — масса электрона,  $e > 0$  — элементарный заряд.

ра температуры внешней фотосферы долгоживущей области, занятой захваченной магнитным полем горячей  $e^+e^-$ -плазмой и находящимися в термодинамическом равновесии с ней фотонами (так называемый trapped fireball).

Во всех рассматриваемых астрофизических приложениях реакция  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  проходит в присутствии сильного внешнего магнитного поля и плазмы, которая может иметь высокую плотность и температуру. Исследование процесса  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  в сильном магнитном поле с учетом того, что дисперсия фотона приводит к значительным отклонениям от коллинеарной кинематики, было проведено в работе [11]. Влияние плазмы на вероятность расщепления фотона проявляется двумя путями. С одной стороны, она модифицирует дисперсионные свойства фотонов, с другой – изменяет амплитуду процесса. Первый фактор был рассмотрен в работах [3, 12]. Было показано, что присутствие холодной и слабо замагниченной плазмы не меняет правил отбора, если плотность плазмы не слишком велика ( $n_e \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ) [3]. В работе [12] была вычислена вероятность процесса с учетом влияния плазмы на дисперсию фотонов, но с использованием амплитуд, полученных в присутствии слабого магнитного поля, но не плазмы. Было показано, что при таком подходе влияние плазмы пренебрежимо мало везде, кроме очень узкого диапазона параметров плазмы и магнитного поля.

Изменение амплитуды расщепления фотона в присутствии магнитного поля и плазмы было рассмотрено в работах [13, 14] на основе эффективно-го лагранжиана Эйлера–Гейзенберга с учетом термальных поправок в одно- и двухпетлевых приближениях. Было показано, что в низкотемпературном пределе процесс  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  может конкурировать с другими реакциями поглощения, такими как эффект Комптона.

Другой подход был рассмотрен в работе [15], где амплитуды и коэффициент поглощения расщепления фотона в пределе сильного поля были вычислены с учетом изменения электронного пропагатора в магнитном поле. Основным результатом был вывод о том, что влияние плазмы является пренебрежимо малым. Тем не менее оценки коэффициента поглощения, полученные там, неточны в высокоэнергетическом пределе, так как использованные выражения применимы только для низкоэнергетических приближений. Однако в работах [13–15] не рассматривались эффекты, связанные с влиянием плазмы на дисперсионные свойства фотонов.

Совместный учет влияния замагниченной среды как на амплитуду расщепления фотона, так и на изменение его дисперсионных свойств был проведен в работах [16, 17]. В них были получены модифицированные правила отбора по поляризациям: запрещенный в отсутствие плазмы канал оказался открыт, а вероятности в каналах, разрешенных в чистом магнитном поле (замагниченном вакууме), оказались подавлены. Кроме того, в них было проведено сравнение вероятностей процессов расщепления и слияния фотонов с комптоновским рассеянием и было показано, что реакция расщепления фотона может конкурировать с процессом комптоновского рассеяния при условии наличия разреженной плазмы ( $T \ll m$ ) и в результате может давать вклад в формирование спектров аномальных рентгеновских пульсаров и источников мягких повторяющихся гамма-всплесков.

Дополнительным фактором помимо чистого магнитного поля и плазмы, изменяющим дисперсионные свойства фотона, может быть влияние связанных состояний, например, позитрония. На первый взгляд, его вклад в поляризационный оператор фотона должен быть следующего порядка малости по постоянной тонкой структуры  $\alpha$ , однако в сильном магнитном поле он приводит к существенному изменению дисперсионных свойств фотона в окрестности циклотронного резонанса [18], что, в свою очередь, влияет на вероятность самого процесса. В частности, в работе [19] было исследовано влияние позитрония на дисперсионные свойства и амплитуды процесса радиационного распада нейтрино,  $\nu \rightarrow \nu\gamma$ , в сильном магнитном поле. Было показано, что учет эффектов, связанных с позитронием, приводит к значительному увеличению вероятности данного процесса. Естественно ожидать, что такое влияние позитрония на дисперсию фотона приведет к изменению вероятности процесса расщепления фотона.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 с использованием ранее полученных результатов для дисперсии фотона в сильном магнитном поле с учетом влияния позитрония получены новые правила отбора для реакции расщепления фотона. В разд. 3 приведены результаты численных расчетов вероятности процесса  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  в сильном магнитном поле с учетом влияния позитрония на дисперсию фотонов для разрешенных каналов. В разд. 4 оценивается эффективность производства поляризованных фотонов за счет рассматриваемого процесса. В Заключение приведено обсуждение полученных результатов.

## 2. ДИСПЕРСИЯ ФОТОНА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПОЗИТРОНИЯ

Хорошо известно, что распространение излучения в любой активной среде удобно описывать в терминах нормальных мод [17], т. е. на языке собственных функций  $\varepsilon_\alpha$  и собственных значений  $\varkappa$  поляризационного оператора, которые определяют поляризационные и дисперсионные свойства фотона соответственно.

При этом в чистом магнитном поле физически наблюдаемыми будут фотоны, обладающие только двумя поляризационными состояниями [20], которым соответствуют векторы поляризации <sup>2)</sup>

$$\varepsilon_\alpha^{(1)}(q) = \frac{(q\varphi)_\alpha}{\sqrt{q_\perp^2}}, \quad \varepsilon_\alpha^{(2)}(q) = \frac{(q\tilde{\varphi})_\alpha}{\sqrt{q_\parallel^2}} \quad (1)$$

с определенным законом дисперсии (см., например, работы [11, 20]).

С другой стороны, учет вклада связанных состояний может изменить эту ситуацию. В частности, как было показано в работе [18], в сильном магнитном поле ( $B \gg B_e$ ) вклад возбужденных состояний позитрония в поляризационный оператор фотона подавлен относительно вклада основного состояния фактором порядка  $B/B_e\alpha^2 \gg 1$ . При этом рождение позитрония в основном состоянии фотоном моды 1 или однофотонный распад на него кинематически запрещены, таким образом, закон дисперсии для фотона моды 1 практически не изменяется и остается близким к вакуумному, а 4-вектор энергии-импульса является при этом пространственно-подобным,  $q^2 \lesssim 0$  [11].

Однако для фотона моды 2 этот вывод кардинально меняется. Закон дисперсии для фотона моды 2 определяется из уравнения  $q^2 - \varkappa^{(2)} = 0$ , где  $\varkappa^{(2)}$  — собственное значение поляризационного оператора в сильном магнитном поле, которое с учетом влияния позитрония имеет следующий вид [19]:

$$\varkappa^{(2)} = -\alpha\beta \exp(-\rho) \left( \frac{2}{\pi} H(z) + \frac{2\lambda z}{1 - \lambda^2 - z} \right), \quad (2)$$

Здесь  $\rho = q_\perp^2/2\beta$ ,  $z = q_\parallel^2/4m^2$ , функция  $H(z)$  определяется следующим образом:

$$H(z) = \frac{1}{\sqrt{z(1-z)}} \times \times \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{z}{1-z}} - 1, \quad 0 \leq z \leq 1, \quad (3)$$

$$H(z) = -\frac{1}{2\sqrt{z(1-z)}} \ln \frac{\sqrt{z} + \sqrt{z-1}}{\sqrt{z} - \sqrt{z-1}} - 1 + \frac{i\pi}{2\sqrt{z(z-1)}}, \quad z > 1, \quad (4)$$

$$\lambda = \frac{\alpha}{2} (\ln(4.5u) - 2.44 \ln(\ln(0.15u))), \quad (5)$$

$$u = \frac{\beta \exp(E_i(-\rho))}{\alpha^2 \rho} \gg 1,$$

$E_i$  — интегральная показательная функция:

$$E_i(-\xi) = \int_{-\infty}^{-\xi} \frac{\exp(t)}{t} dt. \quad (6)$$

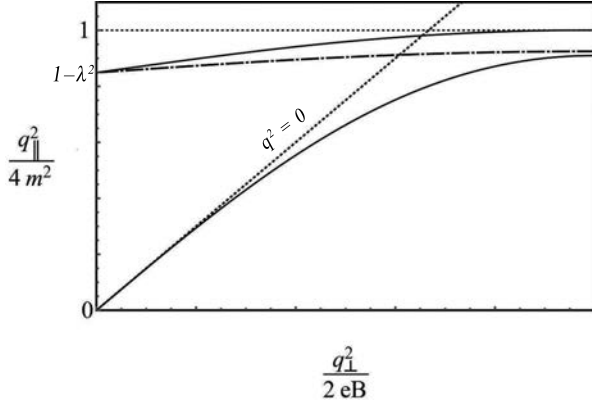
Поляризационный оператор фотона с учетом влияния связанной электрон-позитронной пары позволяет найти закон дисперсии  $q_\parallel^2 = f(q_\perp^2)$  для фотона второй моды в окрестности циклотронного резонанса,  $q_\parallel^2 = 4m^2$ , в которой влияние позитрония велико. Спектральная линия фотона расщепляется на две (рис. 1). Верхняя из них с ростом  $q_\perp^2$  асимптотически стремится к спектральной линии  $q_\parallel^2 = 4m^2$ , соответствующей  $e^+e^-$ -паре со свободными электроном и позитроном, покоящимися относительно друг друга. Нижняя кривая приближается к спектральной линии позитрония  $q_\parallel^2/4m^2 = 1 - \lambda^2(\rho)$  (штрихпунктирная линия на рис. 1).

Как видно из формул (2) и (3), (4), собственное значение поляризационного оператора для фотона моды 2 становится большим в окрестности циклотронного резонанса. Поэтому при расчете наблюдаемых характеристик (вероятность расщепления, количество рождаемых фотонов и т. д.) необходимо учитывать перенормировку волновой функции фотона:

$$\varepsilon_\alpha^{(2)}(q) \rightarrow \varepsilon_\alpha^{(2)}(q) \sqrt{Z_2}, \quad Z_2^{-1} = 1 - \frac{\partial \varkappa^{(2)}(q)}{\partial \omega^2}. \quad (7)$$

Модифицированный с учетом вклада позитрония поляризационный оператор определяет новые правила отбора по поляризациям фотона для процесса

<sup>2)</sup> Обозначения векторов поляризации символами 1 и 2 соответствуют  $\parallel$ - и  $\perp$ -поляризациям в [3] или  $E$ - и  $O$ -модам в зарядово-симметричной плазме [10].



**Рис. 1.** Закон дисперсии для фотона моды 2 с учетом вклада связанной  $e^+e^-$ -пары в сильном магнитном поле. Сплошные линии — ветви дисперсии фотона моды 2, штрихпунктирная линия — спектральная линия позитрония

$\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ . Как показывает анализ, для верхней ветви дисперсии фотона моды 2 (см. рис. 1) при  $q_{\perp}^2 = 0$  имеем  $q_{\parallel}^2 \simeq 1 - \lambda(0)^2 > 0$ , где  $\lambda$  определяется уравнением (5). Следовательно, для него существует кинематическая область, где  $q^2 > 0$ . Ее наличие открывает новый канал реакции  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$ , полагавшийся закрытым в исследованиях, в которых не учитывалось влияние позитрония на дисперсию. В то же время каналы  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$  и  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$  в этой же области оказываются кинематически закрытыми.

Следует отметить, что аналогичная кинематическая ситуация имеет место для процесса  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$  в сильно замагниченной плазме [17], где также в области  $q^2 > 0$  открывается новый канал расщепления  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$ .

### 3. ВЕРОЯТНОСТЬ ДЛЯ ПРОЦЕССА РАСЩЕПЛЕНИЯ ФОТОНА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПОЗИТРОНИЯ

Для различных астрофизических приложений и, в частности, анализа переноса излучения представляет самостоятельный интерес вычислить вероятность поглощения фотона в реакции  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ . Согласно работе [16], выражение для нее можно представить в следующем виде:

$$W_{\lambda \rightarrow \lambda' \lambda''} = \frac{g_{\lambda' \lambda''}}{32\pi^2 \omega_{\lambda}} \int |\mathcal{M}_{\lambda \rightarrow \lambda' \lambda''}|^2 Z_{\lambda} Z_{\lambda'} Z_{\lambda''} \times \delta(\omega_{\lambda}(\mathbf{k}) - \omega_{\lambda'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') - \omega_{\lambda''}(\mathbf{k}'')) \frac{d^3 k''}{\omega_{\lambda'} \omega_{\lambda''}}, \quad (8)$$

где  $\lambda$  и  $\lambda', \lambda'' = 1, 2$  обозначает поляризацию начального фотона и конечных фотонов соответственно,

$q_{\alpha} = (\omega_{\lambda}, \mathbf{k})$  — 4-вектор энергии-импульса начального фотона,  $q'_{\alpha} = (\omega_{\lambda'}, \mathbf{k}')$  и  $q''_{\alpha} = (\omega_{\lambda''}, \mathbf{k}'')$  — конечных фотонов, фактор  $g_{\lambda' \lambda''} = 1 - (1/2) \delta_{\lambda' \lambda''}$  введен для учета возможной тождественности фотонов в конечном состоянии.

Используя результаты работы [11], можно представить амплитуды расщепления фотона в сильном магнитном поле по разрешенным каналам в следующем виде:

$$\mathcal{M}_{1 \rightarrow 12} = -4\pi i \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \frac{(q'_{\parallel} \varphi q''_{\parallel})(q'_{\perp} \tilde{\varphi} q''_{\perp})}{\sqrt{q_{\parallel}^2 q_{\perp}^2 q_{\parallel}^{\prime 2} q_{\perp}^{\prime 2}}} \times H\left(\frac{q_{\parallel}^{\prime 2}}{4m^2}\right), \quad (9)$$

$$\mathcal{M}_{1 \rightarrow 22} = -4\pi i \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \frac{(q'_{\parallel} q''_{\parallel})_{\parallel}}{\sqrt{q_{\parallel}^2 q_{\perp}^2 q_{\parallel}^{\prime 2} q_{\perp}^{\prime 2}}} \times \left[ (qq'')_{\perp} H\left(\frac{q_{\parallel}^{\prime 2}}{4m^2}\right) + (qq')_{\perp} H\left(\frac{q_{\parallel}^{\prime 2}}{4m^2}\right) \right], \quad (10)$$

$$\mathcal{M}_{2 \rightarrow 11} = \mathcal{M}_{1 \rightarrow 12}(q \leftrightarrow q''), \quad (11)$$

где функция  $H(z)$  определяется формулами (3), (4).

Вероятность расщепления в канале  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$ , который запрещен в чистом магнитном поле без учета вклада позитрония, может быть вычислена аналитически по аналогии с вероятностью расщепления фотона в замагниченной плазме [17]. С учетом дисперсии и перенормировки волновой функции начального фотона она может быть представлена в виде

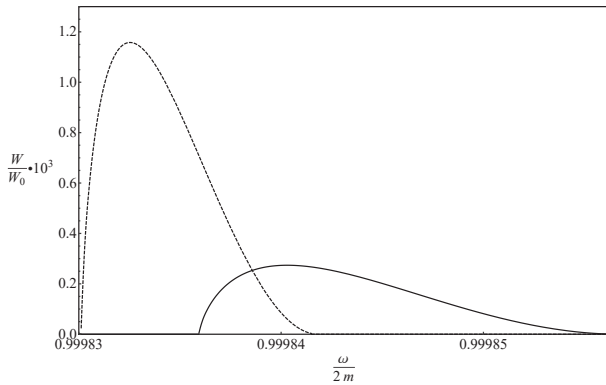
$$W_{2 \rightarrow 11} = \frac{\alpha^3}{8\pi^2} Z_2 H^2\left(\frac{q_{\parallel}^2}{4m^2}\right) \frac{q_{\perp}^2}{\omega} \mathcal{F}\left(\sqrt{\frac{q_{\parallel}^2}{q_{\perp}^2}}\right) \theta(q^2), \quad (12)$$

где  $H(z)$  определяется формулами (3), (4),  $\theta(x)$  — тэта-функция, а

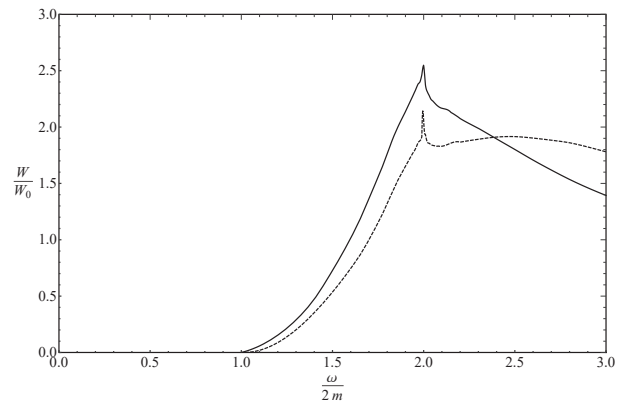
$$\mathcal{F}(z) = 2 \ln z - 1 + z^{-2}. \quad (13)$$

Вероятность процесса поглощения фотона по каналу  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  представлена на рис. 2 как функция энергии начального фотона для магнитных полей  $B = 100B_e$  и  $B = 200B_e$ .

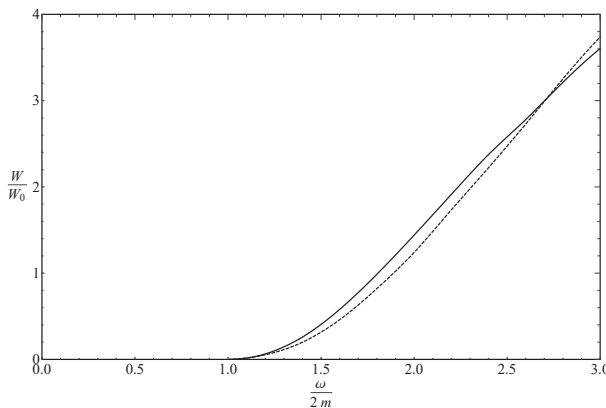
Вероятности поглощения фотона в каналах  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$  и  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$  были получены численно из формулы (8) с подстановкой (9) и (10) и с учетом



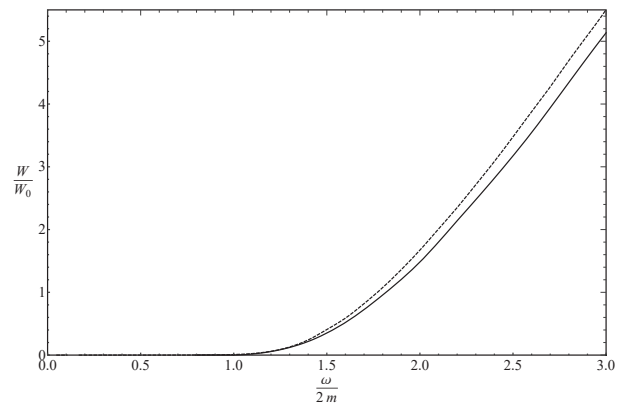
**Рис. 2.** Вероятность поглощения фотона в канале  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  для значений магнитного поля  $B/B_e = 100$  (сплошная линия),  $B/B_e = 200$  (пунктирная линия). Здесь  $W_0 = (\alpha/\pi)^3 m \simeq 3.25 \cdot 10^2 \text{см}^{-1}$



**Рис. 4.** Вероятность поглощения фотона в канале  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$  для значений магнитного поля  $B/B_e = 100$  (сплошная линия),  $B/B_e = 200$  (пунктирная линия). Здесь  $W_0 = (\alpha/\pi)^3 m \simeq 3.25 \cdot 10^2 \text{см}^{-1}$



**Рис. 3.** Вероятность поглощения фотона в канале  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$  для значений магнитного поля  $B/B_e = 100$  (сплошная линия),  $B/B_e = 200$  (пунктирная линия). Здесь  $W_0 = (\alpha/\pi)^3 m \simeq 3.25 \cdot 10^2 \text{см}^{-1}$

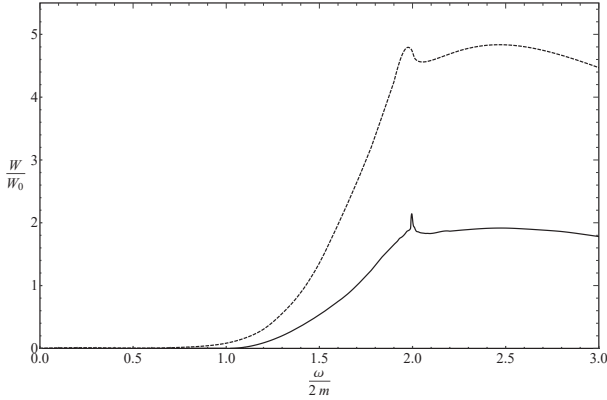


**Рис. 5.** Вероятность поглощения фотона в канале  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$  в сильном магнитном поле ( $B/B_e = 200$ ). Пунктирная линия соответствует вероятности реакции в замагниченном вакууме без учета вклада позитрония [11]. Здесь  $W_0 = (\alpha/\pi)^3 m \simeq 3.25 \cdot 10^2 \text{см}^{-1}$

влияния позитрония на дисперсию и перенормировку волновых функций фотонов для значений индукции магнитного поля  $B = 100B_e$  и  $B = 200B_e$ . На рис. 3–6 они представлены как функции энергии начального фотона. Как видно на рис. 5 и 6, вероятность процесса расщепления фотона в этих каналах оказалась меньше, чем в сильном магнитном поле без учета влияния позитрония. Это связано с тем, что в кинематической области  $q^2 > 0$  эти каналы закрыты. Несмотря на то что для процессов с участием фотона моды 2 вероятность суммируется по двум ветвям дисперсии, в области, в которой данные каналы являются разрешенными, фазовый объем реакции все же оказывается меньше, чем без учета влияния позитрония на дисперсию фотона.

Учет влияния вклада позитрония в дисперсию фотона в сильном магнитном поле без плазмы показал существование ненулевой вероятности распада по каналу  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$ . В кинематической области  $\omega \leq 2m$  канал  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  будет основным, так как каналы  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$  и  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$  кинематически подавлены. Хотя вероятность распада фотона по каналу  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  отлична от нуля только в узком диапазоне энергий начального фотона и при этом значительно уступает по величине вкладу в вероятность за счет комптоновского рассеяния [17], процесс распада фотона может играть важную роль в механизме изменения числа фотонов в моделях излучения источников мягких повторяющихся гамма-всплесков.





**Рис. 6.** Вероятность поглощения фотона в канале  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$  в сильном магнитном поле ( $B/B_e = 200$ ). Пунктирная линия соответствует вероятности реакции в замагниченном вакууме без учета вклада позитрония [11]. Здесь  $W_0 = (\alpha/\pi)^3 m \simeq 3.25 \cdot 10^2 \text{см}^{-1}$

#### 4. ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДСТВА ФОТОНОВ

Как уже отмечалось во Введении, в современных моделях описания радиоизлучения сильно замагниченных нейтронных звезд необходимо эффективное рождение  $e^+e^-$ -плазмы в магнитосфере [9, 21]. В свою очередь, электрон-позитронные пары в сильном магнитном поле  $B \gg B_e$  наиболее вероятно будут рождаться фотонами моды 2 [9, 22, 23], поэтому представляет отдельный интерес вычислить убыль числа фотонов моды 2 за счет реакции  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  в единице объема за единицу времени:

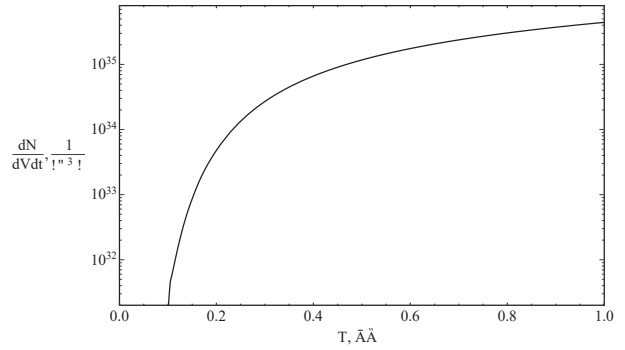
$$\frac{dN}{dVdt} \simeq - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} W_{\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1} f_\omega, \quad (14)$$

где

$$f_\omega = (1 + \exp(\omega/T))^{-1}$$

— равновесная функция распределения фотонов. Модуль этой величины как функция от температуры  $T$  фотонного газа для величины магнитного поля  $B = 200B_e$  представлен на рис. 7.

Численный анализ показывает, что убыль числа фотонов моды 2 в сильном магнитном поле с учетом влияния позитрония за счет распада в канале  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  в том же диапазоне температур на 4–7 порядков меньше, чем в присутствии сильно замагниченной плазмы [17]. Следовательно, влияние позитрония подавляет процесс изменения числа фотонов моды 2. Это можно объяснить тем фактом, что в рассматриваемом в данной работе случае вероятность процесса сильно подавлена перенормировкой



**Рис. 7.** Изменение числа фотонов моды 2 за счет реакции  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  в сильном магнитном поле ( $B/B_e = 200$ ) в единице объема за единицу времени, взятое по модулю

волновой функции фотона (7) из-за близости кинематически разрешенной области энергий начального фотона к порогу  $q_{\parallel}^2 = 4m^2$ . По-видимому, для самосогласованного решения этой задачи необходимо также учесть присутствие замагниченной плазмы и влияние позитрония на амплитуду реакции, что, однако, связано со значительными вычислительными сложностями.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе вычислены вероятности поглощения фотона в процессе расщепления фотона на два,  $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ , в сильном магнитном поле с учетом влияния позитрония на дисперсионные свойства фотонов. Влияние позитрония на вероятность этой реакции является двояким: с одной стороны, дисперсионная линия фотона моды 2 расщепляется на две, с другой — фазовый объем реакции уменьшается. В результате вероятность расщепления фотона по каналам, известным в присутствии магнитного поля, несколько уменьшается. Одновременно с этим открывается новый канал расщепления  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$ , кинематически запрещенный без учета вклада позитрония. Получено выражение для вероятности поглощения фотона в канале  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1\gamma_1$  в аналитической форме. Проведена оценка эффективности изменения числа фотонов моды 2 за счет этого канала.

**Благодарности.** Авторы благодарят А. В. Кузнецова, А. Я. Пархоменко, А. А. Гвоздева и И. С. Огнева за полезные обсуждения и ценные замечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. S. L. Adler, J. N. Bahcall, C. G. Callan, and M. N. Rosenbluth, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1061 (1970).
2. Z. Bialynicka-Birula and I. Bialynicka-Birula, *Phys.Rev. D.* **10**, 2341 (1970).
3. S. L. Adle, *Ann. Phys.* **67**, 599 (1971).
4. A. K. Harding, M. G. Baring, and P. L. Gonthier, *Astrophys. J.* **476**, 246 (1997).
5. C. Thompson and R. C. Duncan, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **275**, 255 (1995).
6. M. G. Baring, *Astrophys. J.* **440**, 69 (1995).
7. M. G. Baring and A. K. Harding, *Astrophys. J. Lett.* **507**, 55 (1998).
8. V. M. Malofeev, O. I. Malov, D. A. Teplykh et al., *Astron. Rep.* **49**, 242 (2005).
9. Ya. N. Istomin and D. N. Sobyenin, *Astron. Lett.* **33**, 660 (2007).
10. C. Thompson and R. C. Duncan, *Astrophys. J.* **561**, 980 (2001).
11. А. В. Кузнецов, Н. В. Михеев, М. В. Чистяков, *ЯФ* **62**, 1638 (1999).
12. T. Bulik, *Acta Astron.* **48**, 695 (1998).
13. P. Elmfors and B.-S. Skagerstam, *Phys. Lett. B* **427**, 197 (1998).
14. H. Gies, *Phys. Rev. D* **61**, 085021 (2000).
15. J. M. Martinez Resco and M. A. Valle Basagoiti, *Phys. Rev. D* **64**, 016006 (2001).
16. Д. А. Румянцев, М. В. Чистяков, *ЖЭТФ* **128**, 740 (2005).
17. M. V. Chistyakov, D. A. Romyantsev, and N. S. Stus', *Phys. Rev. D* **86**, 043007 (2012).
18. A. E. Shabad and V. V. Usov, *Astrophys. Space Sci.* **128**, 377 (1986).
19. Р. А. Аникин, Н. В. Михеев, *ЖЭТФ* **142**, 463 (2012).
20. А. Е. Шабад, *Тр. ФИАН СССР* **192**, 5 (1988).
21. Я. Н. Истомин, Д. Н. Собынин, *ЖЭТФ* **140**, 681 (2011).
22. Н. В. Михеев, М. В. Чистяков, *Письма в ЖЭТФ* **73**, 642 (2001).
23. A. A. Yarkov, D. A. Romyantsev, and M. V. Chistyakov, *Phys. Atom. Nucl.* **85**, 1566 (1988).

# EFFECT OF COLOR RANDOMIZATION ON $p_T$ BROADENING OF FAST PARTONS IN TURBULENT QUARK-GLUON PLASMA

*B. G. Zakharov*\*

*L. D. Landau Institute for Theoretical Physics of the Russian Academy of Sciences  
117334, Moscow, Russia*

Received March 12, 2024,  
revised version March 12, 2024,  
Accepted for publication April 6, 2024

We analyze the effect of the parton color randomization on  $p_T$  broadening in the quark-gluon plasma with turbulent color fields. We calculate the transport coefficient for a simplified model of fluctuating color fields in the form of alternating sequential transverse layers with homogenous transverse chromomagnetic fields with random orientation in the SU(3) group and gaussian distribution in the magnitude. Our numerical results show that the color randomization can lead to a sizable reduction of the turbulent contribution to  $\hat{q}$ . The magnitude of the effect grows with increasing ratio of the electric and magnetic screening masses.

DOI: 10.31857/S0044451024080078

## 1. INTRODUCTION

The experiments on heavy ion collisions at RHIC and the LHC led to the discovery of quark-gluon plasma (QGP). The hydrodynamic simulations (for reviews, see, e.g., Refs. [1–3]) of  $AA$  collisions at the RHIC and LHC energies show that the QGP produced in  $AA$  collisions flows as almost ideal fluid with a very small shear viscosity to entropy density ratio  $\eta/s$ , of the order of the lower bound  $\eta/s \sim 1/4\pi$  [4]. Hydrodynamical analyses give strong evidence for the onset of the collective flow/thermalization regime of the QCD matter at the proper time  $\tau_0 \sim 0.5 - 1$  fm [3, 5]. No clear consensus has emerged on whether these facts can be explained within the paradigm of the weakly coupled QGP. On the one hand, calculations of the shear viscosity in the kinetic theory with  $2 \rightarrow 2$  parton processes in the leading logarithmic approximation [6] give  $\eta/s \sim 0.6$  (for the QCD coupling constant  $g = 2$  and  $N_F = 2.5$ ), that is considerably larger than required for description of the flow effects observed in  $AA$  collisions at RHIC and the LHC. This contradiction of the kinetic theory with binary collisions to data on  $AA$  collisions was confirmed by direct simulation of the QGP evolution in  $AA$  collisions at RHIC energies within the Boltzmann equation performed in [7]. The inclusion of the near collinear

splitting  $1 \leftrightarrow 2$  processes [8] does not change considerably the ratio  $\eta/s$ . However, in [9] it was shown that accounting for the NLO corrections to the formulas of the effective kinetic approach of [8] can considerably reduce  $\eta/s$ <sup>1)</sup>. On the other hand, there is indication that with the inclusion of the large angle  $2 \leftrightarrow 3$  processes the kinetic approach may give  $\eta/s \sim 1/4\pi$  [11] without the NLO corrections to the parton cross sections. Also, the approach of [11] leads to considerable decrease of the thermalization time [12] as compared to the perturbative “bottom-up” scenario [13] based on the Boltzmann equation with  $2 \rightarrow 2$  and near collinear  $2 \leftrightarrow 3$  processes, which does not explain the small thermalization time. However, one should bear in mind that the analyses [7–9, 11–13] ignore the possible plasma instabilities that can appear for anisotropic initial parton system produced in  $AA$  collisions [14–16]. Possible importance of the QGP instabilities for  $AA$  collisions was first discussed in [17]. One of the important QGP instabilities is the chromomagnetic instability similar to the Weibel instability in the ordinary plasmas [18]. The unstable chromomagnetic modes of the gluon field due to the color Weibel instability must appear due to strong anisotropy of the initial parton distribution [13–15, 19] for which the transverse parton momenta

<sup>1)</sup> The large difference between LO and NLO results of [9] arises from the large NLO correction to  $\hat{q}$  obtained in [10], which is used in the framework of [9] for description of the small angle parton scattering within the Fokker-Plank approximation.

\* E-mail: bgz@itp.ac.ru

are larger than that along the beam axis. The generation of the unstable color fields can accelerate the thermalization [19, 20]. From the point of view of the flow effects in  $AA$  collisions, it is important that interaction of the thermal partons with the random color fields can reduce the parton mean free path in the QGP, and consequently can decrease the viscosity of the QGP produced in  $AA$  collisions. This mechanism of generation of a small effective shear viscosity of the QGP in  $AA$  collisions has been addressed in Refs. [21–23]. Also, in [24] it was argued that the turbulent color fields in the QGP can potentially be important for spin transport in  $AA$  collisions. The effect of the instabilities on the QGP evolution in  $AA$  collisions has attracted much attention in the literature (for a review, see Refs. [25, 26]).

The reduction of the QGP shear viscosity in the presence in the QGP of the turbulent collective color fields is closely related to the turbulent enhancement of the transport coefficient  $\hat{q}$  [23]. The transport coefficient  $\hat{q}$  characterizes the mean squared transverse momentum acquired by a fast particle per unit length in the QGP [27]. In terms of  $\hat{q}$  one can obtain the estimate for the typical length,  $\lambda$ , of degradation of the momentum for thermal partons in the QGP:  $\lambda = b\langle p \rangle^2 / \hat{q}$ , where  $\langle p \rangle \sim 3T$  is the average parton momentum, and a reasonable choice for the coefficient  $b$  is  $b \sim 0.5$ . Then, using the fact that in the kinetic theory the shear viscosity is approximately [28, 29]

$$\eta \sim \frac{1}{3} n \langle p \rangle \lambda \quad (1)$$

( $n$  is the parton number density) one can obtain the approximate relation between  $\eta$  and  $\hat{q}$

$$\frac{\eta}{s} \sim \frac{1.5T^3}{\hat{q}}, \quad (2)$$

that agrees reasonably with the estimates given in [23, 30].

Besides the effect of the turbulent contribution to  $\hat{q}$  on the QGP shear viscosity, it is also important for  $p_T$  broadening of fast partons with energy  $E \gg T$  produced in hard processes in  $AA$  collisions. Interaction of fast partons with the collective color fields can also lead to synchrotron-like gluon radiation [31], which may enhance jet quenching in  $AA$  collisions. The effect of the collective background color fields on the  $p_T$  broadening of fast partons in an unstable QGP has been addressed in [32] within the classical approach using Wong's equations [33]. A quantum calculation of  $p_T$  broadening of a fast parton in random color fields have been performed in [34] (in the context of the parton  $p_T$  broadening in

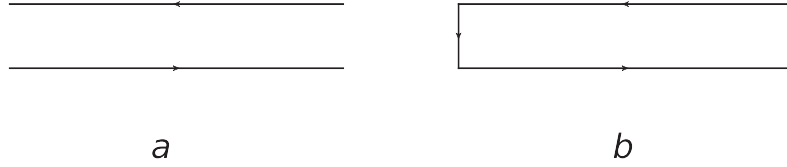
the glasma color fields). The turbulent contribution to  $\hat{q}$  is  $\propto g^2 \epsilon_f r_c$ , where  $\epsilon_f$  is the mean energy density of the turbulent collective fields, and  $r_c$  is the correlation length of these fields. This result is natural and quite transparent since  $p_T$  broadening arises due to random transverse momentum kicks with  $\Delta p_T^2 \sim g^2 \epsilon_f r_c^2$ . However, the calculations of [32, 34] ignore the fact that gluon exchanges between the fast parton and the QGP constituents can change the color state of the fast parton. It is clear that such gluon exchanges will affect the transverse momentum acquired by the fast parton due to interaction with the collective color field, since the change of the fast parton color state changes the Lorentz force. One can expect that this should reduce the turbulent contribution to  $p_T$  broadening, because the color randomization of the fast parton due to the gluon exchanges effectively reduces the correlation length of the Lorentz force in the collective color fields of the QGP. Study of this effect is of interest both from the point of view jet quenching and from the point of view of the turbulent shear viscosity of the QGP [21–23]. The purpose of the present paper is to study this effect quantitatively. We perform calculations for a simplified model of random background chromomagnetic fields with alternate homogeneous field layers.

The paper is organized as follows. In section 2, we give introductory overview of calculations of the contributions to  $p_T$  broadening from scattering in turbulent color fields and from scattering on the thermal partons treating these two mechanisms separately. We give a new alternative simple derivation for  $p_T$  broadening in the turbulent non-abelian fields. In section 3, we develop a formalism for calculation of  $p_T$  broadening in the QGP with fluctuating background fields accounting for the effect of the color randomization of fast partons. In section 4, we present the results of numerical simulations. Conclusions are contained in section 5.

## 2. TURBULENT AND THERMAL CONTRIBUTIONS TO $p_T$ BROADENING

In this section we discuss briefly the quantum formalism for transverse momentum broadening of fast particles passing through high-temperature QED and QCD plasmas. The approach is similar to that used in our previous studies on the propagation of positronium atoms through a matter [35] and on the Landau-Pomeranchuk-Migdal effect in QED and QCD [36].

We assume that the plasma is statistically homogeneous and isotropic. We consider a fast particle with  $E \gg m$  with the initial momentum along the  $z$ -axis. At



**Fig. 1.** (a) The lightlike Wilson lines corresponding to the evolution operator for the transverse density matrix of a fast particle in the eikonal approximation; (b) the closed Wilson loop made of the two lightlike Wilson lines and the transverse segments arising from the Aharonov-Bohm phase factors in the initial and final density matrices

leading order in the particle energy  $E$ , the transverse dynamics of fast particles in an external field can be described in terms of a 2D Schrödinger equation, which governs the  $z$ -evolution (on the light-cone  $t - z = \text{const}$ ) of the transverse wave function [35, 36]. In the transverse Hamiltonian the role of “mass” is played by the particle energy  $E$ . The transverse Green function can be written in the Feynman path integral form [37]

$$K(\boldsymbol{\rho}_2, z_2 | \boldsymbol{\rho}_1, z_1) = \int D\boldsymbol{\rho} \times \exp \left[ i \int_{z_1}^{z_2} dz \frac{M(d\boldsymbol{\rho}/dz)^2}{2} \right] W(\{\boldsymbol{\rho}\}), \quad (3)$$

where  $M = E$ , and

$$W(\{\boldsymbol{\rho}\}, z_2, z_1) = \exp \left[ -ie \int_{z_1}^{z_2} dz (A^0 - A^3 - \mathbf{A}_\perp \cdot \mathbf{v}_\perp) \right] \quad (4)$$

is the Wilson line factor for the trajectory  $\boldsymbol{\rho}(z)$  in the external potential  $A_\mu(t, \boldsymbol{\rho}(z), z)$  at  $t - z = \text{const}$ . In the high energy limit the transverse motion is frozen and the Green function takes the eikonal form (for an abelian external field)

$$K(\boldsymbol{\rho}_2, z_2 | \boldsymbol{\rho}_1, z_1) = \delta(\boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1) W(\boldsymbol{\rho}, z_2, z_1), \quad (5)$$

where

$$W(\boldsymbol{\rho}, z_2, z_1) = \exp \left[ -ie \int_{z_1}^{z_2} dz n^\mu A_\mu \right] = \exp \left[ -ie \int_{z_1}^{z_2} dz (A^0 - A^3) \right] \quad (6)$$

is the lightlike Wilson line factor with  $n^\mu = (1, 0, 0, 1)$  for  $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_1 = \boldsymbol{\rho}_2$ .

In the present analysis we will discuss  $p_T$  broadening in the eikonal approximation. However, using

the path integral representation (3) for the Green functions, one can show that for statistically transverse uniform medium the calculations of  $p_T$  broadening with accurate Green functions give the same results as the eikonal approximation [35, 36]. For this reason, all the results presented in this paper remain valid beyond the eikonal approximation.

## 2.1. $p_T$ broadening in turbulent background fields

### 2.1.1. Abelian field

Let us consider first a charged particle propagating in a fluctuating electromagnetic field. For a given external field, the evolution operator for the transverse density matrix  $\rho(\mathbf{b}, \mathbf{b}', z) = \phi(\mathbf{b}, z)\phi^*(\mathbf{b}', z)$  (hereafter we denote the transverse vectors with bold letters) in the eikonal approximation (corresponding to the diagram of Fig. 1a) reads

$$S(\mathbf{b}, \mathbf{b}', z_2 | \mathbf{b}, \mathbf{b}', z_1) = W(\mathbf{b}, z_2, z_1) W^*(\mathbf{b}', z_2, z_1) = W(\mathbf{b}, z_2, z_1) W(\mathbf{b}', z_1, z_2), \quad (7)$$

where  $W(\mathbf{b}, z_2, z_1)$  and  $W(\mathbf{b}', z_1, z_2)$  are the lightlike Wilson line factors given by (6) corresponding to the paths from  $(\mathbf{b}, z_1)$  to  $(\mathbf{b}, z_2)$  and  $(\mathbf{b}', z_2)$  to  $(\mathbf{b}', z_1)$ , respectively. The first equality in (7) shows that, formally, the operator  $S$  can also be viewed as the eikonal  $S$ -matrix for scattering of  $e^+e^-$  pair. Below this fact will be used to express the thermal contribution to  $\hat{q}$  in terms of the dipole cross section  $\sigma_{e^+e^-}$  (or  $\sigma_{q\bar{q}}$  for the QGP) as was done in [35, 36]. But for  $p_T$  broadening in turbulent fields we treat  $S$  as the evolution operator of the density matrix.

For statistically uniform medium, the value of  $(\mathbf{b} + \mathbf{b}')/2$  is immaterial, and one can take  $\mathbf{b} = -\boldsymbol{\rho}/2$  and  $\mathbf{b}' = \boldsymbol{\rho}/2$  for the eikonal lightlike lines. We take  $z_1 = 0$  and  $z_2 = L$ . We will consider the evolution operator as a function of  $\boldsymbol{\rho}$  and  $L$ . The transverse momentum distribution,  $I(\mathbf{p})$ , of the final particle (for the

initial state with zero transverse momentum) can be written in terms of the operator  $S$  as

$$I(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left\langle \left\langle \langle \rho_{\mathbf{p}} | S | \rho_0 \rangle \right\rangle \right\rangle, \quad (8)$$

where  $\left\langle \left\langle \dots \right\rangle \right\rangle$  means averaging over the ensemble of the background fields,  $\rho_0$  is the density matrix of the initial state with zero transverse momentum, and  $\rho_{\mathbf{p}}$  is the density matrix of the final particle with transverse momentum  $\mathbf{p}$ . We assume that at  $z = z_{1,2}$  the magnetic field vanishes, i.e.,  $\mathbf{A}_{\perp}$  is pure gauge. The density matrix of a particle with the physical transverse momentum  $\mathbf{p}$  in the presence of a non-zero pure gauge transverse vector potential  $\mathbf{A}_{\perp}$  reads

$$\rho_{\mathbf{p}}(z_2, \boldsymbol{\rho}) = \exp[-i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}] \cdot W^*(\boldsymbol{\rho}/2, -\boldsymbol{\rho}/2, z_2), \quad (9)$$

where

$$W(\mathbf{b}', \mathbf{b}, z) = \exp \left[ ie \int d\tau \mathbf{A}_{\perp} \right] \quad (10)$$

is the Wilson line factor for the straight transverse path from  $\mathbf{b}$  to  $\mathbf{b}'$ , which appears due to the Aharonov-Bohm phase shift [38]. Note that in the presence of a real magnetic field, when  $\mathbf{A}_{\perp}$  is not pure gauge, the final particle can not be regarded as having a definite transverse momentum. In this case,  $\mathbf{p}$  can only be determined with uncertainty of the order of the inverse Larmor radius (which corresponds to the relative error  $\Delta p/p \sim eB/p^2$ ).

Using (7), (8) and (9) one can write the momentum distribution of the final parton as

$$I(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\boldsymbol{\rho} \exp[i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}] \left\langle \left\langle W_c(\boldsymbol{\rho}, L) \right\rangle \right\rangle, \quad (11)$$

where  $W_c$  is the Wilson factor for the closed path as shown in Fig. 1b, which includes the two straight lightlike lines and the two transverse segments (corresponding to the Aharonov-Bohm phase factors in the initial and final density matrices)

$$\begin{aligned} W_c(\boldsymbol{\rho}, L) &= W(-\boldsymbol{\rho}/2, z_1, z_2) W(\boldsymbol{\rho}/2, -\boldsymbol{\rho}/2, z_2) \times \\ &\times W(\boldsymbol{\rho}/2, z_2, z_1) W(-\boldsymbol{\rho}/2, \boldsymbol{\rho}/2, z_1) \\ &= \exp \left[ -ie \oint_C dx^{\mu} \hat{A}_{\mu} \right] \quad (12) \end{aligned}$$

with  $z_1 = 0, z_2 = L$ . The definition of  $p_T$  broadening in the QGP in terms of the closed lightlike Wilson loop was suggested in [39, 40] in strong-coupling calculations of  $\hat{q}$  using AdS/CFT correspondence. In [39, 40], it was assumed that  $p_T$  broadening is associated with

the long lightlike Wilson lines, and the effect of two short transverse segments can be ignored. However, one should be in mind that in some cases the whole effect of  $p_T$  broadening may come from the transverse Wilson lines. For instance, this occurs for a fluctuating transverse magnetic field described by a  $z$ -dependent transverse vector potential:  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}_{\perp}(z)$ . In this case the lightlike Wilson factors equal unity, and  $p_T$  broadening arises due to fluctuating Aharonov-Bohm phases in the transverse Wilson factors (or in one of them). This occurs even if the transverse Wilson lines are located outside the medium.

We write the averaged  $W_c$  in the form

$$\left\langle \left\langle W_c(\boldsymbol{\rho}, L) \right\rangle \right\rangle = \exp[-P(\boldsymbol{\rho})]. \quad (13)$$

In terms of the function  $P(\boldsymbol{\rho})$ ,  $I(\mathbf{p})$  reads

$$I(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\boldsymbol{\rho} \exp[i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho} - P(\boldsymbol{\rho})]. \quad (14)$$

The value of  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$  is sensitive to the behavior of  $P(\boldsymbol{\rho})$  at small  $\rho$ . For particle scattering in the collective turbulent fields we have  $P(\boldsymbol{\rho}) \propto \rho^2$  in the limit  $\rho \rightarrow 0$ . In this case, from (14) one obtains

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \nabla^2 P(\boldsymbol{\rho}) \Big|_{\rho=0} = \lim_{\rho \rightarrow 0} 4P(\rho)/\rho^2. \quad (15)$$

The integral over the closed contour  $\oint_C dx^{\mu} A_{\mu}$  in (12) can be transformed in an integral over the surface spanning it with the help of the Stokes theorem

$$\oint_C dx^{\mu} A_{\mu} = \frac{1}{2} \int d\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (16)$$

In the limit of small  $\boldsymbol{\rho}$ , the surface integral on the right hand side of (16) can be written as

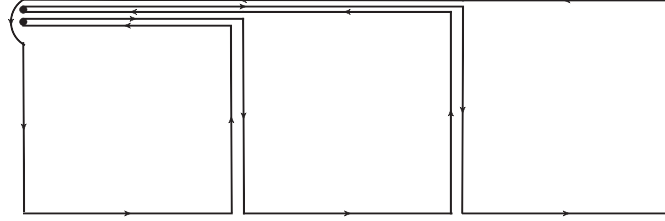
$$\frac{1}{2} \int d\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \approx \int_0^L dz \boldsymbol{\rho}^j F_{j+}, \quad (17)$$

where  $j = 1, 2$  is the transverse index. Using (17) one obtains at small  $\boldsymbol{\rho}$

$$P(\boldsymbol{\rho}) \approx \frac{\rho^2 e^2}{4} \int_0^L dz \int_0^L dz' \left\langle \left\langle F_{i+}(z) F_{i+}(z') \right\rangle \right\rangle, \quad (18)$$

where, for brevity, for  $F_{i+}$  we indicate only the longitudinal component  $z$  of the position four-vector  $x^{\mu} = (z, 0, 0, z)$ . Assuming that the field correlation radius,  $r_c$ , is small compared to the medium thickness  $L$ , from (15) and (18) one obtains

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = 2Le^2 \int_0^{\infty} dz \left\langle \left\langle F_{i+}(z) F_{i+}(0) \right\rangle \right\rangle. \quad (19)$$



**Fig. 2.** A cartoon depicting the deformation of the rectangular Wilson loop of Fig. 1b to rewrite the closed non-abelian Wilson line operator in terms of a surface integral

This formula can be rewritten as

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = 2L \int_0^\infty dz \langle \langle f_i(z) f_i(0) \rangle \rangle, \quad (20)$$

where  $f_i(z) = -eF_{i+}(z)$  is the  $i$ th component of the Lorentz force experienced by the charged particle with velocity  $v \approx 1$  along  $z$  axis. The formulas (19) and (20) are consistent with the physical picture of  $p_T$  broadening as a random walk in the transverse momentum arising from the transverse momentum kicks with  $\langle \Delta \mathbf{p}^2 \rangle \sim e^2 \epsilon_f r_c^2$  in scatterings on the domains of the background fields.

### 2.1.2. Non-abelian field

Consider now  $p_T$  broadening in the non-abelian turbulent collective color fields. It was addressed previously in [32, 34]. Here we give an alternative simple derivation very similar to that given above for the abelian case. In the non-abelian case, the external potential in the Wilson lines shown in Fig. 1 becomes the color operator  $A_\mu = A_\mu^a \mathbf{T}_R^a$ , where  $\mathbf{T}_R^a$  is the color SU(3) generator for the fast parton. And the abelian formula (12) is now replaced by

$$\text{Tr} W_c = \text{Tr} \left[ \mathcal{P} \exp \left( -ig \oint_C dx^\mu A_\mu^a \mathbf{T}_R^a \right) \right], \quad (21)$$

where  $\mathcal{P}$  denotes path ordering of the exponential. We assume that the beginning and the end of the path  $C$  are at the upper left corner of the rectangular contour shown in Fig. 1b. The non-abelian function  $P(\rho)$  is defined as

$$\frac{1}{d_R} \langle \langle \text{Tr} W_c(\rho, L) \rangle \rangle = \exp[-P(\rho)], \quad (22)$$

where  $d_R$  is the dimension of the color representation for the fast parton i.e., for SU(3)  $d_R = 3$  and 8 for quarks and gluons, respectively.

The Wilson line operator  $W_c$  can be rewritten in terms of a surface integral with the help of the non-abelian Stokes theorem [41–44]. For small  $\rho$  this can

be done using the deformation of the contour  $C$  to the one with a sequence of small plaquettes as shown in Fig. 2. Then, we obtain

$$[W_c]_j^i = \mathcal{P}_n \left[ \prod_{n=1}^N U(z_n) \right]_j^i, \quad (23)$$

$$[U(z_n)]_j^i \approx \delta_j^i - \frac{ig}{2} \Delta \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a(z_n) [\Omega_R^+(z_n) \mathbf{T}_R^a \Omega_R(z_n)]_j^i, \quad (24)$$

$$\Omega_R(z_n) = \mathcal{P} \exp \left[ -ig \int_0^{z_n} dz n^\mu A_\mu^a(z) \mathbf{T}_R^a \right]. \quad (25)$$

In (23)–(25) and below we suppress the time component ( $x^0 = z$ ) and the transverse components ( $\mathbf{x}_\perp^{1,2} = 0$ ) of the position four-vectors in arguments of  $F_{\mu\nu}^a$  and  $A_\mu^a$  for notational simplicity. One can rewrite (24) as

$$U(z_n) = \hat{1} - \frac{ig}{2} \Delta \sigma^{\mu\nu} \tilde{F}_{\mu\nu}^a(z_n) \mathbf{T}_R^a, \quad (26)$$

where  $\tilde{F}_{\mu\nu}^a = \Omega_R^+ F_{\mu\nu}^a$  is the color rotated field strength tensor. Using (23), (26) and (21) one obtains

$$\begin{aligned} \text{Tr} W_c \Big|_{\rho \rightarrow 0} &\approx \\ &\approx \text{Tr} \left[ \mathcal{P} \exp \left( -ig \rho^j \int_0^L dz \tilde{F}_{j+}^a(z) \mathbf{T}_R^a \right) \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

Then, using the relation  $\text{Tr}(\mathbf{T}_R^a \mathbf{T}_R^b) = \delta^{ab} d_R C_R / (N_c^2 - 1)$ , from (27) and (15) we obtain the non-abelian counterparts of (18) and (19)

$$\begin{aligned} P(\rho) &\approx \frac{\rho^2 g^2 C_R}{2(N_c^2 - 1)} \times \\ &\times \int_0^L dz_1 \int_0^{z_1} dz_2 \langle \langle \tilde{F}_{i+}^a(z_1) \tilde{F}_{i+}^a(z_2) \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \frac{2Lg^2 C_R}{N_c^2 - 1} \int_0^\infty dz \langle \langle \tilde{F}_{i+}^a(z) \tilde{F}_{i+}^a(0) \rangle \rangle. \quad (29)$$

## 2.2. Thermal contribution to $p_T$ broadening

### 2.2.1. Abelian plasma

Consider now the thermal contribution to  $p_T$  broadening for charged particles in the QED plasma due to multiple scattering on the plasma constituents. The thermal contribution to  $p_T$  broadening in the QED plasma can be treated similarly to the case of ordinary amorphous materials addressed in [35]. The function  $P$  corresponding to the product  $WW^*$  of the Wilson factors for the diagram of Fig. 1a, can be expressed through the Wightman photon field correlator  $\langle\langle A^\mu(x)A^\nu(y)\rangle\rangle$  as

$$P_{th}(\boldsymbol{\rho}) = e^2 L \int_{-\infty}^{\infty} dz [G(z, 0_\perp z) - G(z, \boldsymbol{\rho}, z)], \quad (30)$$

$$G(x - y) = n^\mu n^\nu \langle\langle A_\mu(x)A_\nu(y)\rangle\rangle. \quad (31)$$

In the approximation of the static Debye screened Coulomb centers (similar to that of [45] for the QGP), neglecting correlations between the plasma constituents, the function  $P_{th}(\boldsymbol{\rho})$  given by (30) can be written as

$$P_{th}^{st}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{Ln\sigma_{e^+e^-}(\rho)}{2}, \quad (32)$$

where  $n = 3\xi(3)T^3/\pi^2$  is the number plasma density (for the electron-positron plasma with zero chemical potential, and  $T \gg m_e$ ), and  $\sigma_{e^+e^-}(\rho)$  is the dipole cross section for scattering of the  $e^+e^-$  pair on the scattering center. In the two-photon exchange approximation  $\sigma_{e^+e^-}(\rho)$  reads

$$\sigma_{e^+e^-}(\rho) = \frac{e^4}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{[1 - \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho})]}{(\mathbf{q}^2 + m_D^2)^2}, \quad (33)$$

where  $m_D = eT/\sqrt{3}$  is the Debye mass for the QED plasma [46]. The formula (33) corresponds to the function  $P_{th}(\boldsymbol{\rho})$

$$P_{th}^{st}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} [1 - \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho})] P_{th}^{st}(\mathbf{q}) \quad (34)$$

with

$$P_{th}^{st}(\mathbf{q}) = \frac{Le^4 3\xi(3)T^3}{\pi^2(q^2 + m_D^2)^2}. \quad (35)$$

The ratio

$$C_2(\rho) = \sigma_{e^+e^-}/\rho^2$$

(and  $P_{th}^{st}(\rho)/\rho^2$ ) has a logarithmic dependence  $\propto \ln(1/\rho m_D)$  at  $\rho \ll 1/m_D$  due to the Coulomb tail in scattering on the plasma constituents at  $q^2 \gtrsim m_D^2$ . Due to the appearance of the Coulomb logarithm, for the

thermal contribution the prescription (15) is replaced by

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle \approx \nabla^2 P(\boldsymbol{\rho}) \Big|_{\rho \sim \rho_{min}} \approx 4P(\rho_{min})/\rho_{min}^2, \quad (36)$$

where  $\rho_{min} \sim 1/q_{max}$ , and  $q_{max}$  is the maximal momentum transfer for  $2 \rightarrow 2$  scattering of the fast particle on the plasma constituents (for a relativistic plasma  $q_{max}^2 \sim 6ET$ ). The transport coefficient

$$\hat{q} = d\langle \mathbf{p}^2 \rangle / dL$$

in terms of the function  $C_2$  reads

$$\hat{q}_{th}^{st} = 2nC_2(\rho \sim \rho_{min}). \quad (37)$$

The Coulomb tail leads to a logarithmic increase of  $\hat{q}_{th}$  with the particle energy. In the static model, from (34), (35) and (36) for  $\hat{q}_{th}$  in the leading-logarithmic (LL) approximation one obtains

$$\hat{q}_{th}^{st} \approx \frac{e^4 3\xi(3)T^3}{4\pi^3} \ln\left(\frac{6ET}{m_D^2}\right). \quad (38)$$

In the HTL scheme [47] the  $P_{th}(\mathbf{q})$  can be written as

$$P_{th}^{HTL}(\mathbf{q}) = Le^2 TC(\mathbf{q}) \quad (39)$$

with

$$C(\mathbf{q}) = \frac{m_D^2}{q^2(q^2 + m_D^2)},$$

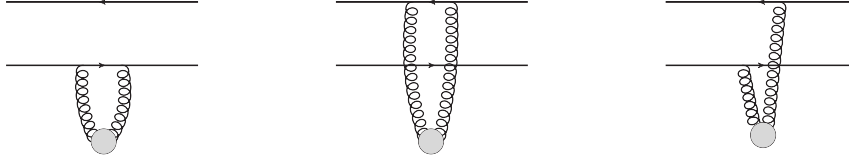
see Ref. [48]. This gives the HTL transport coefficient in the LL approximation

$$\hat{q}_{th}^{HTL} \approx \frac{e^4 T^3}{12\pi} \ln\left(\frac{6ET}{m_D^2}\right). \quad (40)$$

In the HTL scheme the coefficient of the logarithm in  $\hat{q}_{th}$  is smaller by a factor of  $\pi^2/9\xi(3) \approx 0.912$ . This difference is not surprising since the HTL scheme is assumed to be valid only at the momenta  $\sim eT \ll T$ . In principle, since the Coulomb logarithm comes from the broad region  $6ET \gtrsim q^2 \gtrsim m_D^2$ , the prediction of the static model for  $\hat{q}_{th}$  should be more accurate than that of the HTL scheme at  $E \gg m_D^2/T$ . Because in this regime the coefficient of the logarithm is controlled by the number density of the plasma, and this is clearly fulfilled in the static model.

Note that for the QED plasma the turbulent and thermal contributions to  $\hat{q}$  are additive, since these two mechanisms do not affect each other.





**Fig. 3.** Diagrams describing the dipole operator (41) for scattering of  $p\bar{p}$  pair on the plasma constituent in the double-gluon approximation

**2.2.2. Non-abelian plasma**

Calculation of the thermal  $p_T$  broadening in the QGP is very similar that for the QED plasma. Similarly to QED, we can view the upper line  $\leftarrow$  in Fig. 1a as the Wilson line for antiparticle  $\bar{p}$ , since in QCD for a particle  $p$  (quark or gluon) in the color representation  $R$ ,  $-(T_R^a)^*$  equals the color generator  $T_R^a$  for  $\bar{p}$ . Then, similarly to QED, the evolution operator of the non-abelian density matrix can be viewed as  $S$ -matrix for a fictitious  $p\bar{p}$  state. This is valid if we restrict ourselves to contributions of one- and two-gluon exchanges between fast partons and plasma constituents (as shown in Fig. 3).

In the approximation of the static Debye screened color centers [45], the two-gluon exchange amplitude of Fig. 3 acts as a color operator

$$\begin{aligned} \langle p^\beta, \bar{p}^{\bar{\beta}} | \hat{\sigma}(\boldsymbol{\rho}) | p^\alpha, \bar{p}^{\bar{\alpha}} \rangle = & \\ = \frac{C_R C_t g^4}{16\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{1}{(q^2 + m_D^2)^2} \times & \\ \times \left[ \delta_\alpha^\beta \delta_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} - (T_R^a)_\alpha^\beta (T_R^a)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho})}{C_R} \right], & \quad (41) \end{aligned}$$

where  $m_D = gT\sqrt{1 + N_F/6}$  is the Debye mass, and  $C_R$  and  $C_t$  are the Casimir color operators of the fast parton and of the QGP constituent. This formula accounts for that in Fig. 3, due to sum over the color indices of the plasma constituent, the two-gluon  $t$ -channel states are color singlets. This fact guarantees that, after summing over the color indices for the initial/final  $p\bar{p}$  states, all the intermediate  $p\bar{p}$  states between scatterings on different QGP constituents are color singlets. This allows one in calculating the function  $P$  to replace the dipole operator (41) by its expectation value between the color singlet  $p\bar{p}$  states, i.e., by the dipole cross-section

$$\begin{aligned} \sigma_{p\bar{p}}^t(\boldsymbol{\rho}) = \langle \{1\} | \hat{\sigma}(\boldsymbol{\rho}) | \{1\} \rangle = & \\ = \frac{C_R C_t g^4}{16\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{1}{(q^2 + m_D^2)^2} \left[ 1 - \exp(i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}) \right]. & \quad (42) \end{aligned}$$

Then, one obtains for the QCD counterpart of (32)

$$P_{th}^{st}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{L \sum_{t=q,g} n_t \sigma_{p\bar{p}}^t(\boldsymbol{\rho})}{2} = \frac{L n_q^{eff} \sigma_{p\bar{p}}^q(\boldsymbol{\rho})}{2}, \quad (43)$$

where  $n_{q,g}$  are the thermal number densities of quarks and gluons, and  $n_q^{eff}$  is defined as

$$\begin{aligned} n_q^{eff} = n_q + n_g C_A / C_F = & \\ = \xi(3) [N_F 9 + C_A 16 / C_F] T^3 / \pi^2. & \quad (44) \end{aligned}$$

Calculating

$$C_2(\rho_{min}) = \sigma_{p\bar{p}}^q(\rho_{min}) / \rho_{min}^2$$

in the LL approximation one obtains the thermal transport coefficient for the static model

$$\hat{q}_{th}^{st} \approx \frac{g^4 C_R \xi(3) [C_F N_F 9 + C_A 16] T^3}{32\pi^3} \ln \left( \frac{6ET}{m_D^2} \right). \quad (45)$$

In the HTL scheme we have

$$P_{th}^{HTL}(\mathbf{q}) = L g^2 C_R T C(\mathbf{q}), \quad (46)$$

and the transport coefficient in the LL approximation is given by

$$\hat{q}_{th}^{HTL} \approx \frac{g^4 C_R T^3 [1 + N_F / 6]}{4\pi} \ln \left( \frac{6ET}{m_D^2} \right). \quad (47)$$

Comparing (47) and (45) one sees that in the LL approximation the ratio of  $\hat{q}_{th}$  for the HTL scheme to that for the static model is

$$\frac{\pi^2 (1 + N_f / 6)}{6\xi(3) (1 + N_f / 4)} \approx 1.19 \text{ for } N_f = 2.5.$$

Contrary to the QED plasma for the QGP the contributions to  $p_T$  broadening of the thermal and of the background field mechanisms are non-additive, since  $p_T$  broadening due to the background field is modified because the color exchanges between the fast parton and the medium constituents lead to change of the Lorentz force experienced by the fast parton in the background color field. For this reason, the two mechanisms of  $p_T$  broadening in the QGP must be treated on an even footing.

### 3. $p_T$ BROADENING OF FAST PARTONS IN THE QGP WITH SIMULTANEOUS TREATMENT OF THERMAL AND BACKGROUND FIELD EFFECTS

In this section we study the non-additivity of  $p_T$  broadening in the QGP corresponding to the background field and to the thermal mechanisms for a simplified model of the random background field. We consider the case of fluctuating layered background color magnetic field with the transverse layers. We assume that in each layer the magnetic field is purely transverse and homogeneous. The fields in different layers are assumed to be uncorrelated. In this model the layer thickness,  $\Delta L$ , plays the role of the field correlation radius in the real turbulent QGP. The assumption of a purely transverse (and magnetic) field does not seem to be too restrictive, since for  $p_T$  broadening the crucial quantity is the transverse Lorentz force acting on the fast parton. We consider a brick of QGP with  $N \gg 1$  slabs (i.e., with  $L \gg \Delta L$ ) of fluctuating homogeneous transverse color magnetic field  $\mathbf{B}^a$ . The fields in different slabs are assumed to be uncorrelated. For the thermal QGP constituents we use the model of the Debye screened color centers [45] with the dipole color operator given by (41). Also, we present the results treating scattering of the fast parton on the thermal fluctuations for the HTL scheme with a non-zero magnetic screening mass [48]. In each slab we take the external vector potential in the form

$$A^{a\mu} = (0, 0, 0, [\mathbf{B}^a \times \boldsymbol{\rho}]^3) = (0, 0, 0, \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{f}^a). \quad (48)$$

where  $\mathbf{B}^a$  is the transverse chromomagnetic field, and  $\mathbf{f}^a$  is the transverse Lorentz force for  $g = 1$ . We assume that the vector potential is absent at the initial and final points of the lightlike Wilson lines of Fig. 1a, and consequently the transverse Wilson factors can be omitted. We treat the complex conjugated lightlike Wilson factor of the parton  $p$  as that of  $\bar{p}$ .

Our starting point is the evolution operator for the transverse density matrix for the set  $\{f\} = (f_1, \dots, f_N)$  of the Lorentz forces acting in the layers  $1, \dots, N$ , written as

$$S(\boldsymbol{\rho}, L, \{f\}) = W_p(-\boldsymbol{\rho}/2, L, \{f\})W_{\bar{p}}(\boldsymbol{\rho}/2, L, \{f\}). \quad (49)$$

The transverse momentum distribution  $I(\mathbf{p})$  can be written as

$$I(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int d\boldsymbol{\rho} \exp[i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\rho}] \langle \langle \{1\} | S(\boldsymbol{\rho}, L, \{f\}) | \{1\} \rangle \rangle, \quad (50)$$

where  $|\{1\}\rangle$  is the color singlet wave function of the  $p\bar{p}$  pair, and  $\langle \langle \dots \rangle \rangle$  means averaging over the ensemble of the fluctuating chromomagnetic fields and of the positions of the scattering centers. These two averagings can be performed independently. The averaging over the chromomagnetic fields is equivalent to averaging over the vectors of the color Lorentz forces  $\mathbf{f}$  for all the layers. For a given set  $\{f\}$  of the Lorentz forces in the slabs, the expectation value of the evolution operator  $S$  between the color singlet initial and final  $p\bar{p}$  states can be written as

$$\begin{aligned} \langle \{1\} | S(\boldsymbol{\rho}, L, \{f\}) | \{1\} \rangle &= \\ &= \sum_{\Psi_1, \dots, \Psi_{N-1}} \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, z_{N+1}, z_N, f_N) | \Psi_{N-1} \rangle \dots \times \\ &\times \langle \Psi_2 | s(\boldsymbol{\rho}, z_2, z_1, f_2) | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_1 | s(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_0, f_1) | \{1\} \rangle, \end{aligned} \quad (51)$$

where

$$z_i = z_1 + \Delta L(i - 1),$$

$\Delta L = L/N$  is the slab thickness,  $f_i$  is the Lorentz force in the slab  $i$  (we omit the transverse space and color indices), and  $s(\boldsymbol{\rho}, z_{i+1}, z_i, f_i)$  is the evolution operator for a slab of the QGP in the interval  $(z_i, z_{i+1})$  with the Lorentz force  $f_i$ . For each of the  $i = 1, \dots, N$  slabs, by a proper SU(3) rotation  $U_i$ , one can transform the color Lorentz force vector  $f_i^a$  to the one with components in the Cartan subalgebra (i.e., with nonzero components only for  $a = 3$  and  $a = 8$ ). Of course, the necessary matrices  $U_i$  may differ for different layers. Assuming that the background color fields in different slabs are uncorrelated, the averaging over the background fields can be performed by independent integrations over the SU(3) rotations  $U_i$  of the Cartan vectors  $f_i$  for each of the slabs, and subsequent averaging over the Cartan vectors  $f_i$  in each layer. Fortunately, one can avoid integrations over the SU(3) rotations  $U_i$ . We use the fact that for any color operator  $O$ , depending on the color vector  $f$ , the color wave function  $|\Psi\rangle$  defined as

$$|\Psi\rangle = \int dU O(Uf) |\{1\}\rangle \quad (52)$$

can contain only color singlet states. This means that in calculating the averaged over the chromomagnetic fields expectation value of the operator  $S$ , on the right hand side of (51) all the intermediate color states  $\Psi_i$  can be replaced by the color singlet state  $\{1\}$ . After this replacement, due to the relations

$$\begin{aligned} \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, z_{i+1}, z_i, U_i f_i) | \{1\} \rangle &= \\ &= \langle \{1\} | U_i s(\boldsymbol{\rho}, z_{i+1}, z_i, f_i) U_i^{-1} | \{1\} \rangle = \\ &= \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, z_{i+1}, z_i, f_i) | \{1\} \rangle, \end{aligned} \quad (53)$$

we can exclude all the SU(3) rotation operators  $U_i$ . Thus, we are left only with averaging over the Cartan color vectors  $f_i^a$  with  $a = 3, 8$ . Since the integrations over the Cartan vectors are independent in different layers, we obtain

$$\begin{aligned} & \left\langle \left\langle \langle \{1\} | S(\boldsymbol{\rho}, L, \{f\}) | \{1\} \rangle \right\rangle \right\rangle = \\ & = \left[ \left\langle \left\langle \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, \Delta L, 0, f) | \{1\} \rangle \right\rangle \right\rangle_f \right]^N, \end{aligned} \quad (54)$$

where  $\left\langle \left\langle \dots \right\rangle \right\rangle_f$  means averaging over the Cartan vectors  $f$ . Note that the above formulas remain valid if we include averaging over the positions of the color centers (corresponding to the thermal part of  $p_T$  broadening) since for the double-gluon exchange amplitude (shown in Fig. 3) the  $t$ -channel gluons are in the color singlet state. Thus, in our model the problem is reduced to calculation of the scattering matrix for a single slab of the QGP with a homogeneous background chromomagnetic field. We perform calculations for the Gaussian distributions of the Cartan components of the Lorentz force color vectors  $\mathbf{f}_a$  with  $a = 3, 8$

$$\frac{1}{\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{\mathbf{f}_a^2}{\sigma^2}\right). \quad (55)$$

The interaction of quarks with the Cartan background fields  $f_{3,8}$  is diagonal, i.e., it changes only the phase of the  $q\bar{q}$  wave function. But it is not the case for gluons. To diagonalize the interaction of gluons with the background field, as in [31], we use the gluon states having definite color isospin,  $Q_A$ , and color hypercharge,  $Q_B$ , (we will denote the color charge by the two-dimensional vector  $Q = (Q_A, Q_B)$ ). The diagonal color gluon states, in terms of the usual gluon vector potential,  $G_a$  ( $a = 1 \dots, 8$ ), read (the Lorentz indices are omitted)

$$\begin{aligned} X &= (G_1 + iG_2)/\sqrt{2} \quad (Q = (-1, 0)), \\ Y &= (G_4 + iG_5)/\sqrt{2} \quad (Q = (-1/2, -\sqrt{3}/2)), \\ Z &= (G_6 + iG_7)/\sqrt{2} \quad (Q = (1/2, -\sqrt{3}/2)). \end{aligned}$$

The neutral gluons  $A = G_3$  and  $B = G_8$  have  $Q = (0, 0)$ , and do not interact with the background field. Note that, despite the fact that the initial  $p\bar{p}$  state is the color singlet (due to the contraction of the color indices) after propagation through the background field the non-singlet components appear, nevertheless the total color charge  $Q_p + Q_{\bar{p}}$  of the  $p\bar{p}$  pair remains zero.

We assume that the two-gluon operator (41) can be viewed as a local in the longitudinal coordinate  $z$  (this

is the standard assumption in models of jet quenching). In this approximation one can ignore the overlap in the coordinate  $z$  of the background field effects and the two-gluon exchanges on the  $p\bar{p}$  state. We divide the  $z$ -interval  $(0, \Delta L)$  into a linear grid of  $M$  cells with width  $h = \Delta L/M$ . We assume that the two-gluon exchanges can only occur in the middle of the cells, i.e., at the transverse slices

$$z_i = \Delta L(i - 1/2)/M, \quad i = 1, \dots, M.$$

The background field, that acts outside of these slices, changes only the phase of the intermediate  $p\bar{p}$  states. We will denote the color wave functions of the intermediate  $p\bar{p}$  states in the chromomagnetic field as  $\psi$ . Since the external field does not change the total color charge we have only  $p\bar{p}$  states with  $Q_p + Q_{\bar{p}} = 0$ . The phase factor for the intermediate  $p\bar{p}$  pair in a color state  $\psi$  after propagating through the medium a distance  $\Delta z$  reads

$$\Phi_\psi(\Delta z, Q, \boldsymbol{\rho}, f) = \exp\left[ig\Delta z \boldsymbol{\rho}^i \sum_{a=3,8} Q^a f_i^a\right], \quad (56)$$

where

$$Q^a = (Q_p^a - Q_{\bar{p}}^a)/2 = Q_p^a.$$

For quarks we have 3 types of the color neutral  $q\bar{q}$  intermediate states:

$$\begin{aligned} q^1 \bar{q}^1 & \quad (Q = (1/2, 1/2\sqrt{3})), \\ q^2 \bar{q}^2 & \quad (Q = (-1/2, 1/2\sqrt{3})), \\ q^3 \bar{q}^3 & \quad (Q = (0, -1/\sqrt{3})). \end{aligned}$$

For gluons (in the basis of charged and neutral gluons) we have 10 types of the color neutral  $g\bar{g}$  states: 6 states made of charged gluons,

$$\begin{aligned} X\bar{X} & \quad (Q = (-1, 0)), \\ Y\bar{Y} & \quad (Q = (-1/2, -\sqrt{3}/2)), \\ Z\bar{Z} & \quad (Q = (1/2, -\sqrt{3}/2)), \\ \bar{X}X & \quad (Q = (1, 0)), \\ \bar{Y}Y & \quad (Q = (1/2, \sqrt{3}/2)), \\ \bar{Z}Z & \quad (Q = (-1/2, \sqrt{3}/2)), \end{aligned}$$

and 4 states with  $Q = (0, 0)$  made of neutral gluons,

$$AA, \quad BB, \quad AB, \quad BA.$$

So for quarks the operator  $s$  is  $3 \times 3$  matrix, and for gluons it is  $10 \times 10$  matrix.

For a given background field (i. e., before averaging over the color fields) the  $s$ -matrix element averaged over the thermal states of the QGP can be written as

$$\begin{aligned} & \left\langle \left\langle \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, \Delta L, 0, \boldsymbol{\rho}, f) | \{1\} \rangle \right\rangle_{th} = \right. \\ & = \sum_{\psi_1, \dots, \psi_{M+1}} \langle \{1\} | \psi_{M+1} \rangle \times \\ & \times \Phi(\boldsymbol{\rho}, h/2, Q_{M+1}, f) \langle \psi_{M+1} | V_M(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_M \rangle \\ & \times \Phi(\boldsymbol{\rho}, h, Q_M, f) \dots \Phi(\boldsymbol{\rho}, h, Q_3, f) \langle \psi_3 | V_2(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_2 \rangle \times \\ & \times \Phi(\boldsymbol{\rho}, h, Q_2, f) \langle \psi_2 | V_1(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_1 \rangle \times \\ & \times \Phi(\boldsymbol{\rho}, h/2, Q_1, f) \langle \psi_1 | \{1\} \rangle, \quad (57) \end{aligned}$$

where the operator  $V_i$  reads (the index  $i$  indicates that the operator acts at the longitudinal coordinate  $z = z_i$ )

$$V_i(\boldsymbol{\rho}, h) = \hat{1} - \frac{nh}{2} \hat{\sigma}(\boldsymbol{\rho}). \quad (58)$$

The formula (58) corresponds to the first order term of the standard Glauber series, that appears after averaging over positions of the scattering centers. One can introduce the total phase factor  $\Phi_{tot}(\boldsymbol{\rho}, h, \{Q\}, f)$  defined as the product of the phase factors  $\Phi$  for all the intermediate states  $\psi_i$ , for the set of the color charges  $\{Q\} = (Q_{M+1}, \dots, Q_1)$  corresponding to the color charges of the parton  $p$  in the set of the intermediate states  $\{\psi\} = (\psi_{M+1}, \dots, \psi_1)$ . Then, the matrix element of the operator  $s$  averaged over the thermal states and over the color Lorentz force  $f$  can be written as

$$\begin{aligned} & \left\langle \left\langle \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, \Delta L, 0, f) | \{1\} \rangle \right\rangle = \right. \\ & = \sum_{\psi_1, \dots, \psi_{M+1}} \langle \{1\} | \psi_{M+1} \rangle \langle \psi_{M+1} | V_M(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_M \rangle \dots \times \\ & \times \langle \psi_3 | V_2(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | V_1(\boldsymbol{\rho}, h) | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \{1\} \rangle \times \\ & \times \left\langle \left\langle \Phi_{tot}(\boldsymbol{\rho}, h, \{Q\}, f) \right\rangle \right\rangle_f, \quad (59) \end{aligned}$$

where the averaged of the color Lorentz force factor  $\Phi_{tot}$  (calculated using the Gaussian distribution (55)) reads

$$\begin{aligned} & \left\langle \left\langle \Phi_{tot}(\boldsymbol{\rho}, h, \{Q\}, f) \right\rangle \right\rangle_f = \\ & = \exp \left\{ -\frac{\boldsymbol{\rho}^2 g^2 \sigma^2 h^2}{4} \sum_{a=3,8} \left[ \sum_{k=1}^{M+1} \eta_k Q_k^a \right]^2 \right\} \quad (60) \end{aligned}$$

with  $\eta_k = 1/2$  for  $k = 1$  and  $M + 1$ , and  $\eta_k = 1$  for  $1 < k < M + 1$ .

The  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$  for one slab of the QGP with the background field in terms of  $s$  reads

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}^2 \rangle & = -4 \frac{d}{d\rho^2} \times \\ & \times \ln \left[ \left\langle \left\langle \langle \{1\} | s(\boldsymbol{\rho}, \Delta L, 0, f) | \{1\} \rangle \right\rangle \right\rangle_{\rho \sim 1/q_{max}} \right]. \quad (61) \end{aligned}$$

To calculate  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$  using (61) we write the operator  $V$  as

$$V(\boldsymbol{\rho}, h) = V(0, h) + v(\boldsymbol{\rho}, h) \quad (62)$$

with  $v(\boldsymbol{\rho}, h) = V(\boldsymbol{\rho}, h) - V(0, h)$ . Using (41) and (58) we obtain at small  $\boldsymbol{\rho}$

$$\begin{aligned} V_{\alpha\bar{\alpha}}^{\beta\bar{\beta}}(0, h) & = \delta_{\alpha}^{\beta} \delta_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} - \\ & - \frac{nhC_R C_t g^4}{32\pi m_D^2} \left[ \delta_{\alpha}^{\beta} \delta_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} - \frac{(T_R^a)_{\alpha}^{\beta} (T_R^a)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}}}{C_R} \right], \quad (63) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v_{\alpha\bar{\alpha}}^{\beta\bar{\beta}}(\boldsymbol{\rho}, h) & \approx -\frac{\rho^2 h n_q^{eff} C_2(\rho_{min})}{2C_R} (T_R^a)_{\alpha}^{\beta} (T_R^a)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} = \\ & = -\frac{\rho^2 h \hat{q}_R}{4C_R} (T_R^a)_{\alpha}^{\beta} (T_R^a)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}}. \quad (64) \end{aligned}$$

In (64) we used that  $\hat{q} = 2nC_2$ . Note that  $V(\boldsymbol{\rho} = 0, h) \neq \hat{1}$  because the operator  $\hat{\sigma}(\boldsymbol{\rho})$  given by (41) does not vanish at  $\boldsymbol{\rho} = 0$  (only its expectation value between color singlet states vanishes at  $\boldsymbol{\rho} = 0$ ). Note that the  $V(0, h)$  can be rewritten in terms of the parton mean free path in the QGP  $\lambda_{mfp} = 1/n\sigma_p$  as

$$\begin{aligned} V_{\alpha\bar{\alpha}}^{\beta\bar{\beta}}(0, h) & = \delta_{\alpha}^{\beta} \delta_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} - \\ & - \frac{h}{\lambda_{mfp}} \left[ \delta_{\alpha}^{\beta} \delta_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} - \frac{(T_R^a)_{\alpha}^{\beta} (T_R^a)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}}}{C_R} \right], \quad (65) \end{aligned}$$

with

$$\lambda_{mfp}^{-1} = n \int_0^{q_{max}^2} dq^2 \frac{d\sigma_p}{dq^2} \approx \frac{nC_R C_t g^4}{32\pi m_D^2}. \quad (66)$$

The  $\lambda_{mfp}$  characterizes the length of the color randomization of the parton  $p$  in the QGP [49]. Note that  $\lambda_{mfp}$  defined by (66) is smaller than the mean free path  $\lambda$  in the formula of the kinetic theory [28, 29] for  $\eta(1)$ . The latter is related to the transport cross section

$$\lambda^{-1} = n\sigma_p^{tr}$$

with

$$\sigma_p^{tr} = \int d\sigma_p \sin^2 \theta \approx \frac{4}{s} \int d\sigma_p q^2,$$

which is smaller than the total cross section entering (66). Note that the HTL counterpart of (66), defined by

$$\lambda_{mfp}^{-1} \Big|_{HTL} \approx \frac{g^2 C_R T}{4\pi} \int_0^{q_{max}^2} dq^2 C(q^2) \quad (67)$$

gives logarithmically divergent  $\lambda_{mfp}^{-1}$  for the standard HTL formula for  $C(q^2)$  derived in [48]

$$C(q^2) = \frac{1}{q^2} - \frac{1}{q^2 + m_D^2}. \quad (68)$$

This occurs due to the  $1/q^2$  term in (68), which comes from the transverse part of the gluon polarization tensor  $\Pi_T$ , and is related to the absence of screening for the transverse static gluons, i.e., due to zero magnetic screening mass, defined in the HTL scheme as

$$m_M^2 = \text{Re}\Pi_T(0) = 0,$$

see [48]. In general, it is invalid [50]. In [48] it was suggested to account for the nonzero magnetic mass in the HTL calculation of the factor  $C$  by using  $\text{Re}\Pi_T(0) = m_M^2$  with nonzero  $m_M$ . This leads to

$$C(q^2) = \frac{1}{q^2 + m_M^2} - \frac{1}{q^2 + m_D^2}. \quad (69)$$

Substituting this into (67), we obtain

$$\lambda_{mfp}^{-1} \Big|_{HTL, m_M \neq 0} \approx \frac{g^2 C_R T}{4\pi} \ln \left( \frac{m_D^2}{m_M^2} \right). \quad (70)$$

Lattice calculations of [51, 52] give  $m_D/m_M \sim 2 - 3$ . This can lead to a sizeable logarithmic increase of  $\lambda_{mfp}$  for the HTL scheme with magnetic mass as compared to the model with the static color centers [45]. Note that the sensitivity of the color relaxation time (and conductivity) to the ratio  $m_D/m_M$  was discussed long ago in [49].

From (61) using (59), (60), (63) and (64) we obtain for one slab

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \langle \mathbf{p}^2 \rangle_{th} + \langle \mathbf{p}^2 \rangle_f, \quad (71)$$

where  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle_{th, f}$  correspond to  $p_T$  broadening due to rescatterings on the thermal QGP constituents and scattering in the background turbulent field affected by the color randomization due to particle rescatterings on the thermal partons. The thermal contribution, which comes from  $v$ , reads

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle_{th} = -\frac{Mh\hat{q}_R}{C_R} \{1\}_\beta^{\bar{\beta}} (T_R^\alpha)^\beta (T_R^\alpha)_{\bar{\alpha}}^{\bar{\beta}} \{1\}_\alpha^{\bar{\alpha}} = \Delta L \hat{q}_R. \quad (72)$$

To obtain (72), we used that in (59), without the phase factor  $\Phi_{tot}$ , all the intermediate projectors  $|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$  can be replaced by  $|\{1\}\rangle\langle\{1\}|$ . In this case, the right hand side of (59) in the limit of small  $\rho$  becomes

$$\begin{aligned} & \langle \{1\} | V(0, h) + v(\rho, h) | \{1\} \rangle^M \approx \\ & \approx 1 + M \langle \{1\} | v(\rho, h) | \{1\} \rangle, \end{aligned} \quad (73)$$

that, after substitution into (61), leads to (72) (which agrees with calculations of the thermal  $p_T$  given in section 2, as it must be). The  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle_f$  term in (71) comes from the Taylor expansion of the phase factor  $\Phi_{tot}$  and the matrix elements of  $V(0, h)$  in (59). Using (59), (60) and (61) one can obtain

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}^2 \rangle_f &= h^2 g^2 \sigma^2 \times \\ & \times \sum_{\psi_1, \dots, \psi_{M+1}} \langle \{1\} | \psi_{M+1} \rangle \langle \psi_{M+1} | V(0, h) | \psi_M \rangle \cdots \times \\ & \times \langle \psi_3 | V(0, h) | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | V(0, h) | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \{1\} \rangle \times \\ & \times \sum_{a=3,8} \left[ \sum_{k=1}^{M+1} \eta_k Q_k^a \right]^2. \end{aligned} \quad (74)$$

The background field contribution to the transport coefficient is

$$\hat{q}_R^f = \frac{\langle p_T^2 \rangle_f}{\Delta L}.$$

The formula (74), together with (63), can be used for numerical calculation of the turbulent contribution to the transport coefficient. Note that for quarks summing over the color index  $a$  in the second term inside the square brackets in (63) can be performed analytically with the help of the Fierz identity for triplet color generators:

$$(\mathbf{t}^a)_m^l (\mathbf{t}^a)_k^i = \frac{1}{2} \delta_m^i \delta_k^l - \frac{1}{2N_c} \delta_k^i \delta_m^l.$$

For gluon color generators we performed summing over  $a$  in (63) numerically.

In the absence of rescatterings we have  $V(0, h) = 1$  (see Eq. (63), and (74) is reduced to

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle_f = h^2 M^2 g^2 \sigma^2 \sum_{a=3,8} \langle Q_8^a \rangle_{\{1\}}. \quad (75)$$

From this relation, using

$$\langle \{1\} | Q_3^2 + Q_8^2 | \{1\} \rangle = \frac{2C_R}{N_c^2 - 1},$$

we obtain in our model without the thermal contribution

$$\hat{q}_R = \frac{2C_R \Delta L g^2 \sigma^2}{N_c^2 - 1}. \quad (76)$$

This prediction agrees with formula (29) because in our model

$$\left\langle \left\langle \tilde{F}_{i+}^a(z) \tilde{F}_{i+}^a(0) \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \tilde{F}_{i+}^a(0) \tilde{F}_{i+}^a(0) \right\rangle \right\rangle \cdot F(z) \quad (77)$$

with

$$\left\langle \left\langle \tilde{F}_{i+}^a(0) \tilde{F}_{i+}^a(0) \right\rangle \right\rangle = 2\sigma^2,$$

and

$$F(z) = \begin{cases} 1 - |z|/\Delta L & \text{if } |z| < \Delta L, \\ 0 & \text{if } |z| > \Delta L. \end{cases} \quad (78)$$

It is worth noting that the formulas (77) and (78) show that our simplified model of the random background fields nevertheless leads to a quite reasonable form of the field strength correlation function. For this reason, one can expect that the use of the multilayer homogeneous fields cannot greatly distort the results.

Note, finally, that although in our model we use a specific geometry for the color exchanges, physically, it is evident that it cannot be crucial for our predictions. Because the only important quantity for the magnitude of the effect of the color randomization on  $p_T$  broadening is the ratio  $\Delta L/\lambda_{mfp}$ , which is clearly insensitive to the specific choice of the  $z$ -distribution of the color exchanges of the fast parton in a slab.

#### 4. NUMERICAL RESULTS

In this section, we present numerical results for  $\hat{q}$  using formulas of previous section<sup>2)</sup>. We use the QCD coupling constant  $g = 2$ . To characterize the magnitude of the background color field we use the ratio of the chromomagnetic field energy density  $\epsilon_f = B^2/2$  to the total QGP energy density  $\alpha = \epsilon_f/\epsilon_{tot}$ . We define the total QGP energy density in terms of the equilibrium temperature in the ideal gas model:

$$\epsilon_{tot} = \left( \frac{8\pi^2}{15} + \frac{7\pi^2 N_f}{20} \right) T^4 \approx 13.9T^4$$

(we take  $N_f = 2.5$ ). We assume that the magnetic field is isotropic. In this case for the Gaussian parameter  $\sigma$  in (55) we have  $\sigma^2 = (2/3)\alpha\epsilon_{tot}$ . We perform calculations of  $\hat{q}$  for  $T = 350$  MeV, which seems to be reasonable for the initial stage of the QGP evolution at  $\tau \sim 1 - 2$  fm for heavy ion collisions at the LHC energies. In the absence of realistic calculations of the turbulent QCD matter evolution in  $AA$  collisions, the

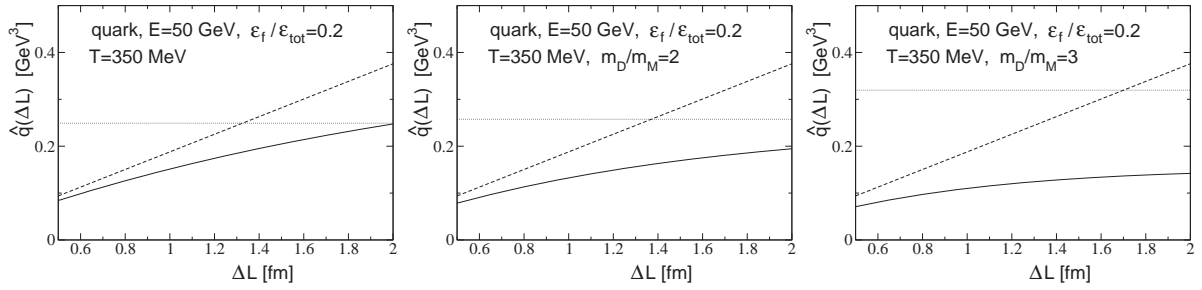
<sup>2)</sup> Note that our numerical calculations demonstrated that for gluons the last two states made of color neutral gluons  $AB$  and  $BA$  do not contribute to  $\hat{q}$ , i.e., for gluons calculations can be performed with  $8 \times 8$  matrix.

characteristics of the turbulent magnetic fields can not be obtained theoretically. We perform calculations for  $\alpha = 0.2$  and  $0.3$ . Such values of  $\alpha$  can lead to reasonable values of the ratio  $\eta/s$  in the scenario with the dominant contribution of the turbulent fields to the QGP shear viscosity [21–23]. The ratio of the chromomagnetic energy to the total QGP energy substantially higher than  $0.2 - 0.3$  looks unrealistic.

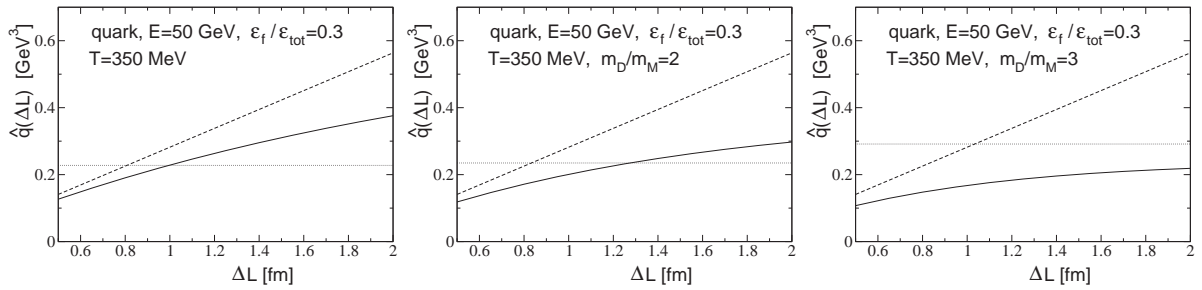
For quarks we perform calculations of  $\hat{q}$  for  $\Delta L$  in the interval between  $0.5$  to  $2$  fm. We present the results obtained for the number of slices (in Eq. (57))  $M = 15$ . For the HTL version with  $m_D/m_M = 3$ , that has the smallest  $\lambda_{mfp}$ , the estimated errors are  $\lesssim 2\%$  at  $L \sim 2$  fm, and are  $\lesssim 0.5\%$  at  $L \lesssim 1$  fm (for  $m_D/m_M = 2$  the errors becomes smaller by a factor of  $\sim 2 - 3$ ). For the static model even at  $L \sim 2$  fm the errors are  $\lesssim 0.3\%$ . For gluons the needed computational resources are considerably larger than for quarks (for the same value of  $M$ ). For this reason we performed calculations for  $M = 10$ . For the HTL version we restricted the maximal values of  $\Delta L$  ( $\Delta L < 1.1(1.5)$  fm for  $m_D/m_M = 3(2)$ ) to avoid regions where the errors may be too large. For the static model we present the results for the interval  $0.5 < \Delta L < 2$  fm (in this interval the estimated errors are  $\lesssim 3\%$  at  $L \sim 2$  fm, and are  $\lesssim 0.7\%$  at  $L \lesssim 1$  fm).

In Figs. 4–7 we present results for the contribution to  $\hat{q}$  for quark and gluon from scattering on the thermal constituents, and from scattering in the random chromomagnetic fields without and with the effect of the parton color randomization. The calculations are performed for the parton energy  $E = 50$  GeV. Note that in our model only the thermal contribution to  $\hat{q}$  depends on the parton energy (due to the energy dependence of the Coulomb logarithm). From Figs. 4–7 one can see that the effect of the parton color randomization reduces the turbulent contribution to  $\hat{q}$  by a factor of  $\sim 0.8$  at  $\Delta L \sim 1$  and  $\sim 0.65$  at  $\Delta L \sim 2$  fm for the static model (the reduction is approximately the same for quarks and gluons). For the HTL scheme the effect is stronger. For  $m_D/m_M = 2(3)$ , the color randomization reduces the turbulent  $\hat{q}$  for quarks by a factor of  $0.7(0.6)$  at  $\Delta L \sim 1$  fm and by a factor of  $0.5(0.4)$  at  $\Delta L \sim 2$  fm. The magnitude of the reduction of the turbulent  $\hat{q}$  for gluons due to the color randomization at  $\Delta L \sim 1$  fm in the HTL scheme is similar to that for quarks.

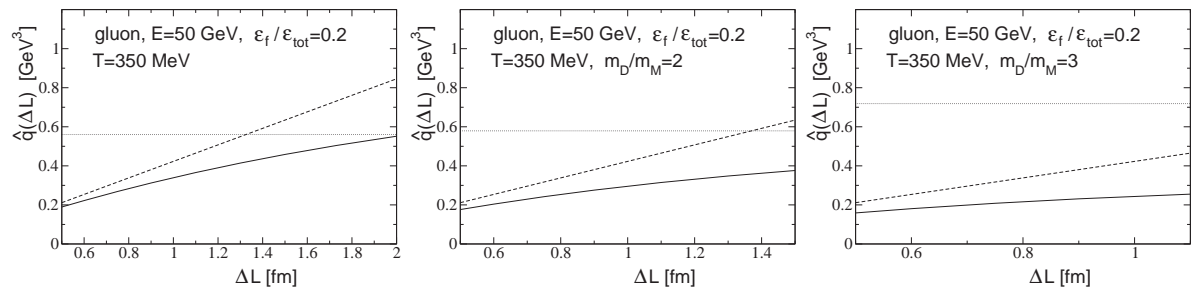
Note that, since the turbulent contribution to  $\hat{q}$  is approximately energy independent, one can expect that our results should be valid for the thermal partons as well. The effect of the parton color randomization should lead to some increase of the turbulent



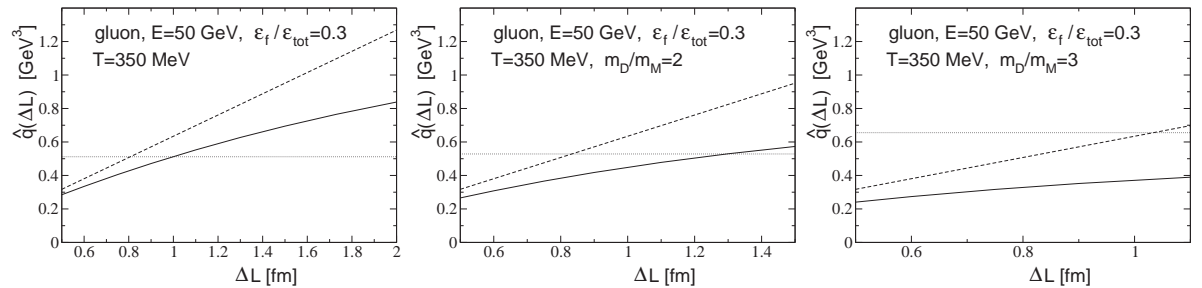
**Fig. 4.** The transport coefficient  $\hat{q}$  for quark with energy  $E = 50$  GeV in the QGP with  $T = 350$  MeV,  $\epsilon_f/\epsilon_{tot} = 0.2$  as a function of  $\Delta L$  for the static model (left) and for the HTL scheme with  $m_D/m_M = 2$  (middle) and  $m_D/m_M = 3$  (right). Solid line: the turbulent contribution to  $\hat{q}$  obtained accounting for the color randomization of the fast parton; dashed line: the turbulent contribution without the color randomization of the fast parton; dashed line: the thermal contribution



**Fig. 5.** The same as in Fig. 4 for  $\epsilon_f/\epsilon_{tot} = 0.3$



**Fig. 6.** The same as in Fig. 4 for gluon



**Fig. 7.** The same as in Fig. 5 for gluon

shear viscosity as compared to predictions without the color randomization (like that of [21,22]). For the HTL scheme with  $m_D/m_M = 2(3)$  the ratio  $\eta/s$  should become bigger by a factor of  $\sim 1.2 - 1.5(1.3 - 1.8)$  for  $\Delta L \sim 0.5 - 1$  fm.

Finally, it is worth noting that the suppression of  $\hat{q}_f$  due to the color randomization of fast partons may be enhanced by the effects of the running coupling, that have been ignored in the present analysis. The lattice calculations of [53] show that at small virtualities the in-medium  $\alpha_s$  may grow up to  $\sim 0.5 - 0.8$ . The growth of  $\alpha_s$  at low momenta (and the perturbative logarithmic decrease at high momenta) is more important for the parton color randomization length  $\lambda_{mfp}$  entering (65) than for the thermal transport coefficient  $\hat{q}_{th}$  (for which the relative contribution of the low momentum region is suppressed by the factor  $q^2$ ). For this reason, the suppression effect of the color randomization on the turbulent contribution to  $\hat{q}$  should be bigger for the scheme with the running coupling (if the models with the fixed and the running coupling lead to similar predictions for the thermal transport coefficient).

## 5. CONCLUSIONS

We have analyzed the effect of the parton color randomization on the  $p_T$  broadening of fast partons in the QGP with turbulent color fields that can be generated in the QGP formed in  $AA$  collisions due to the non-abelian Weibel instabilities. Calculations of the transverse momentum broadening of a fast parton traversing the turbulent QGP ignoring its interaction with the QGP constituents give the transport coefficient  $\hat{q}$  approximately proportional to the product of the mean field energy  $\epsilon_f$  and the correlation length  $r_c$  of the turbulent color fields. The gluon exchanges between the fast parton and the thermal partons change the color charge of the fast parton, that lead to random variation of the Lorentz force experienced by the fast parton. This acts as a reduction of the correlation length of the turbulent color fields, and reduces the transport coefficient.

We performed calculations of  $\hat{q}$  for a simplified model of fluctuating color fields in the form of alternating sequential transverse layers of thickness  $\Delta L$  of homogeneous transverse chromomagnetic fields with random orientation in the  $SU(3)$  group, and gaussian distribution in the magnitude. We demonstrated that calculation of  $\hat{q}$  may be reduced to calculation of  $p_T$  broadening in a single layer. We presented the one-layer  $\langle p_T^2 \rangle$  in a form which is convenient for numerical simula-

tions. We performed calculations using for the color exchanges between the fast parton and the thermal partons the static model of the Debye screened color centers [45] and the HTL scheme [47] with a nonzero magnetic mass [48]. Our numerical results show that the color randomization can lead to a sizable reduction of the turbulent contribution to  $\hat{q}$ . We find that the reduction of  $\hat{q}$  due to the color randomization is bigger for the HTL scheme, for which the effect grows with increasing  $m_D/m_M$ . For the HTL version with  $m_D/m_M = 3$  we obtained the suppression of the turbulent contribution to  $\hat{q}$  by a factor of  $\sim 0.6$  for  $\Delta L \sim 1$  and  $\sim 0.4$  for  $\sim 2$  fm. We have found that the reduction of the turbulent contribution to  $\hat{q}$  due to the parton color randomization is very similar for quarks and gluons. The magnitude of the suppression is weakly dependent on the average energy of the turbulent color fields in the QGP.

**Funding.** This work is supported by the State program FFWR-2024-0011.

## REFERENCES

1. R. Derradi de Souza, T. Koide, and T. Kodama, Prog. Part. Nucl. Phys. **86**, 35 (2016) [arXiv:1506.03863].
2. P. Romatschke and U. Romatschke, *Relativistic Fluid Dynamics In and Out of Equilibrium*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, (2019), ISBN: 978-1-108-48368-1, 978-1-108-75002-8, DOI: 10.1017/9781108651998 [arXiv:1712.05815].
3. U. Heinz and R. Snellings, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **63**, 123 (2013) DOI: 10.1146/annurev-nucl-102212-170540 [arXiv:1301.2826].
4. P. Kovtun, D.T. Son, and A. O. Starinets, Phys. Rev. Lett. **94**, 111601 (2005) [hep-th/0405231].
5. H. Song, S. A. Bass, U. Heinz, and T. Hirano, Phys. Rev. C **83**, 054910 (2011), Erratum: Phys. Rev. C **86**, 059903 (2012) DOI: 10.1103/PhysRevC.86.059903, 10.1103/PhysRevC.83.054910 [arXiv:1101.4638].
6. P. B. Arnold, G. D. Moore, and L. G. Yaffe, JHEP **11**, 001 (2000) [hep-ph/0010177].
7. D. Molnar and M. Gyulassy, Nucl. Phys. **A697**, 495 (2002), Nucl. Phys. **A703**, 893 (2002) (erratum) [nucl-th/0104073].



8. P. B. Arnold, G. D. Moore, and L. G. Yaffe, JHEP **05**, 051 (2003) [hep-ph/0302165].
9. J. Ghiglieri, G. D. Moore, and D. Teaney, JHEP **03**, 179 (2018) [arXiv:1802.09535].
10. S. Caron-Huot, Phys. Rev. D **79**, 065039 (2009) [arXiv:0811.1603].
11. Z. Xu and C. Greiner, Phys. Rev. Lett. **100**, 172301 (2008) [arXiv:0710.5719].
12. Z. Xu and C. Greiner, Phys. Rev. C **71**, 064901 (2005) [hep-ph/0406278].
13. R. Baier, A.H. Mueller, D. Schiff, and D.T. Son, Phys. Lett. B **502**, 51 (2001) [hep-ph/0009237].
14. P. B. Arnold, J. Lenaghan, and G. D. Moore, JHEP **08**, 002 (2003) [hep-ph/0307325].
15. S. Mrowczynski, Acta Phys. Polon. B **37**, 427 (2006) [hep-ph/0511052].
16. P. Romatschke and M. Strickland, Phys. Rev. D **68**, 036004 (2003) [hep-ph/0304092].
17. S. Mrówczyński, Phys. Lett. B **214** 587 (1988); *ibid.* B **393**, 26 (1997); Phys. Rev. C **49**, 2191 (1994).
18. E. S. Weibel, Phys. Rev. Lett. **2**, 83 (1959).
19. P. B. Arnold and G. D. Moore, Phys. Rev. D **76**, 045009 (2007) [arXiv:0706.0490].
20. P. Arnold and G. D. Moore, Phys. Rev. D **73**, 025006 (2006) [hep-ph/0509206].
21. M. Asakawa, S. A. Bass, and B. Muller, Phys. Rev. Lett. **96**, 252301 (2006) [hep-ph/0603092].
22. M. Asakawa, S. A. Bass, and B. Muller, Prog. Theor. Phys. **116**, 725 (2007) [hep-ph/0608270].
23. A. Majumder, B. Muller, and X.-N. Wang, Phys. Rev. Lett. **99**, 192301 (2007) [hep-ph/0703082].
24. B. Muller and D.-L. Yang, Acta Phys. Polon. Supp. **16**, 37 (2023) [arXiv:2207.14504].
25. S. Mrowczynski, B. Schenke, and M. Strickland, Phys. Rept. **682**, 1 (2017) [arXiv:1603.08946].
26. I. Dremin, M. Kirakosyan, and A. Leonidov, Adv. High Energy Phys. **2013**, 706521 (2013) [arXiv:1305.3812].
27. R. Baier, Y. L. Dokshitzer, A. H. Mueller, S. Peigné, and D. Schiff, Nucl. Phys. B **484**, 265 (1997) [hep-ph/9608322].
28. F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill (1965).
29. P. Danielewicz and M. Gyulassy, Phys. Rev. D **31**, 53 (1985).
30. B. Muller, Phys. Rev. D **104**, L071501 (2021) [arXiv:2107.14775].
31. B. G. Zakharov, JETP Lett. **88**, 475 (2008) [arXiv:0809.0599].
32. M. E. Carrington, S. Mrowczynski, and B. Schenke, Phys. Rev. C **95**, 024906 (2017) [arXiv:1607.02359].
33. S. K. Wong, Nuovo Cim. A **65**, 689 (1970).
34. A. Ipp, D. I. Müller, and D. Schuh, Phys. Rev. D **102**, 074001 (2020) [arXiv:2001.10001].
35. B. G. Zakharov, Sov. J. Nucl. Phys. **46**, 92 (1987).
36. B. G. Zakharov, JETP Lett. **63**, 952 (1996) [hep-ph/9607440]; *ibid.* **65**, 615 (1997) [hep-ph/9704255]; *ibid.* **70**, 176 (1999) [hep-ph/9906536]; Phys. Atom. Nucl. **61**, 838 (1998) [hep-ph/9807540].
37. R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGRAW-HILL Book Company, New York (1965).
38. Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
39. H. Liu, K. Rajagopal, and U. A. Wiedemann, Phys. Rev. Lett. **97**, 182301 (2006) [hep-ph/0605178].
40. H. Liu, K. Rajagopal, and U. A. Wiedemann, JHEP **03**, 066 (2007) [hep-ph/0612168].
41. Ya. Aref'eva, Theor. Math. Phys. **43**, 353 (1980).
42. N. E. Bralić, Phys. Rev. D **22**, 3090 (1980).
43. P. M. Fishbane, S. Gasiorowicz, and P. Kaus, Phys. Rev. D **24**, 2324 (1981).
44. Yu. A. Simonov, Sov. J. Nucl. Phys. **50**, 134 (1989) [Yad. Fiz. **50**, 213 (1989)].

45. M. Gyulassy and X. N. Wang, Nucl. Phys. B **420**, 583 (1994) DOI: 10.1016/0550-3213(94)90079-5 [nucl-th/9306003].
46. M. H. Thoma, Rev. Mod. Phys. **81**, 959 (2009) [arXiv:0801.0956].
47. E. Braaten and R. D. Pisarski, Nucl. Phys. B **337**, 569 (1990); B **339**, 310 (1990); J. Frenkel, J. C. Taylor, Nucl. Phys. B **334**, 199 (1990); Nucl. Phys. B **374**, 156 (1992).
48. P. Aurenche, F. Gelis and H. Zaraket, JHEP **0205**, 043 (2002) [hep-ph/0204146].
49. A. V. Selikhov and M. Gyulassy, Phys. Lett. B **316**, 373 (1993) [nucl-th/9307007].
50. D. J. Gross, R. D. Pisarski, and L. G. Yaffe, Rev. Mod. Phys. **53**, 13 (1981).
51. Y. Maezawa et al. [WHOT-QCD Collaboration], Phys. Rev. D **81**, 091501 (2010) [arXiv:1003.1361].
52. A. Nakamura, T. Saito, and S. Sakai, Phys. Rev. D **69**, 014506 (2004) [hep-lat/0311024].
53. A. Bazavov et al., Phys. Rev. D **98**, 054511 (2018) DOI: 10.1103/PhysRevD.98.054511 [arXiv:1804.10600].

# АТОМНЫЙ МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ Ge НА ПОВЕРХНОСТИ Si(111) НА ДИФФУЗИЮ АДАТОМОВ Ge

Р. А. Жачук\*

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 13 февраля 2024 г.,  
после переработки 1 апреля 2024 г.  
Принята к публикации 2 апреля 2024 г.

С помощью расчетов на основе теории функционала плотности исследован атомный механизм влияния деформаций сжатия, образующихся на поверхности эпитаксиальных слоев Ge(111)- $7 \times 7$ , выращенных на подложке Si(111), на диффузию адатомов Ge. Было найдено, что энергетический барьер, ограничивающий миграцию адатомов Ge на большие расстояния, расположен вблизи угловых вакансий структуры  $7 \times 7$  и вызван образованием ковалентной связи между адатомом Ge и атомом димера в составе структуры  $7 \times 7$ . Показано, что увеличение барьера на упруго-сжатой поверхности происходит из-за усиления связи в димере при сжатии поверхности, что ведет к ослаблению связи между адатомом Ge и атомом димера.

DOI: 10.31857/S004445102408008X

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Диффузия адатомов по поверхности кристаллов оказывает непосредственное влияние на рост тонких пленок, их морфологию и формирование наноструктур и поэтому является важной темой исследований. Одним из факторов, которые могут влиять на диффузию адатомов, являются упругие деформации решетки поверхности.

Ранее было экспериментально показано, что энергия активации диффузии адатомов на поверхностях металлов уменьшается при латеральном сжатии решетки поверхности, и был теоретически изучен механизм этого явления [1, 2]. Было обнаружено, что при сжатии поверхности металлов адатомы располагаются дальше от нее и поэтому имеют менее гофрированный потенциал.

Однако зависимость энергии активации диффузии от знака деформации решетки на поверхностях ковалентных кристаллов, таких как Si или Ge, может иметь более сложный характер из-за направленных и локализованных связей между адатомами и атомами поверхности. Одной из наиболее ис-

следованных упруго-напряженных систем является Ge на поверхности Si. Это вызвано тем, что наноструктуры, сформированные на основе Ge/Si, перспективны для применения в оптоэлектронных приборах [3]. Постоянная решетки Ge примерно на 4% больше, чем Si, и поэтому слои Ge, выращенные на поверхности Si, оказываются сжаты в латеральном направлении.

Ранее Черепановым и Фойхтлендером было экспериментально показано, что энергии активации диффузии адатомов Ge на поверхности слоев Ge(111)- $7 \times 7$ , выращенных на Si(111), увеличивается при сжатии решетки [4, 5]. Однако объяснения этому явлению не было дано. Целью данной работы являлось определение атомного механизма увеличения энергии активации самодиффузии по поверхности Ge(111)- $7 \times 7$  при ее сжатии.

## 2. ДЕТАЛИ РАССЧЕТОВ

Для исследования динамики адатома Ge на поверхности Ge(111) была рассчитана потенциальная энергия для этого атома на основе теории функционала плотности. При расчете использовалась общепринятая модель структуры  $7 \times 7$ , состоящая из димеров, адатомов и дефектов упаковки (dimers — adatoms — stacking faults, DAS) [6].

\* E-mail: zhachuk@gmail.com

Известно, что эта структура является устойчивой на поверхности Ge(111) в некотором диапазоне деформаций сжатия [7, 8]. Расчеты были выполнены с помощью программного пакета SIESTA, использующего атомные орбитали в качестве базисных функций [9]. Был использован обменно-корреляционный функционал в приближении обобщенного градиента (generalized gradient approximation, GGA) [10]. Для описания валентных электронов атомов Ge использовались по два набора  $s$ - и  $p$ -орбиталей и один набор  $d$ -орбиталей (13 функций на атом). Остальные детали расчетов аналогичны использованным нами ранее для исследования диффузии атомов Sr по поверхности Si(111)- $7 \times 7$  [11].

Для вычисления зависимости потенциальной энергии адатома Ge от положения в ячейке  $7 \times 7$  поверхности, этот атом помещался на высоте примерно  $3 \text{ \AA}$  над поверхностью Ge(111). Координата  $z$  атома (в направлении, перпендикулярном поверхности) могла свободно изменяться, а координаты в плоскости  $xy$  были фиксированы. Система релаксировала до тех пор, пока силы, действующие на атомы, становились менее  $0.01 \text{ эВ/\AA}$ . В результате получалась поверхность потенциальной энергии для адсорбированного атома  $E(x, y)$ .

Расстояние между узлами гексагональной решетки поверхности, на которой вычислялись значения потенциальной энергии, составляло примерно  $0.6 \text{ \AA}$ . Точные значения энергий локальных минимумов  $E(x, y)$  вычислялись с использованием свободно движущегося адатома Ge, помещенного вблизи локального минимума поверхности потенциальной энергии. Погрешность расчетных значений энергетических барьеров, вызванная конечным расстоянием между узлами гексагональной решетки, не превышала  $0.1 \text{ эВ}$ .

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

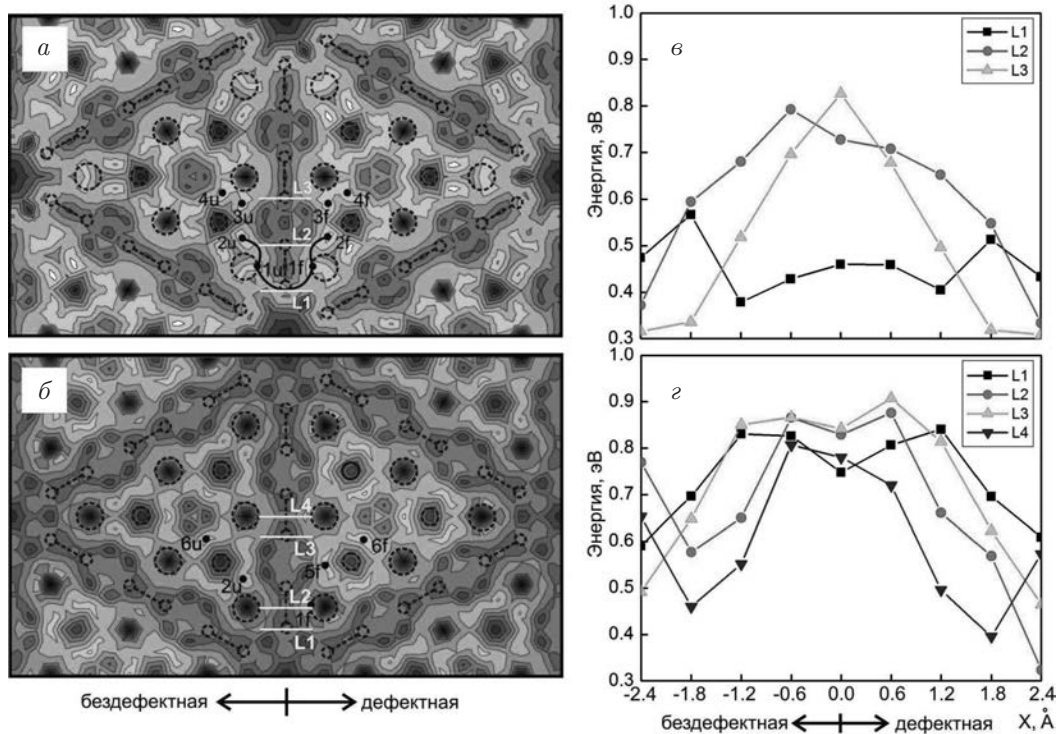
На рис. 1а,б показаны рассчитанные поверхности потенциальной энергии  $E(x, y)$  для адатома Ge на недеформированной и упруго-сжатой на 4% поверхностях Ge(111)- $7 \times 7$ . Светлые (темные) области соответствуют низкой (высокой) энергии системы соответственно. Относительные энергии локальных минимумов адатома (пронумерованных от 1 до 6) на этих поверхностях, расположенных в бездефектной (unfaulted,  $u$ ) и дефектной (faulted,  $f$ ) половинках ячейки  $7 \times 7$ , приведены в таблице. Можно видеть, что локальные минимумы энергии поверхности расположены вблизи адатомов и рест-атомов структуры  $7 \times 7$ , где адсорбированный атом может насытить сразу несколько оборванных связей

**Таблица.** Относительные энергии (эВ) локальных минимумов адатома Ge на поверхности Ge(111)- $7 \times 7$ .  $N$  — номер минимума согласно рис. 1а,б, индексы  $u$  и  $f$  — относятся к бездефектной (unfaulted) и дефектной (faulted) половинкам ячеек  $7 \times 7$ . Для каждой из поверхностей (недеформированной и упруго-сжатой на 4%) за начало шкалы энергии принята энергия наиболее глубокого минимума

N	Недеформир.		Упруго-сжатая	
	$u$	$f$	$u$	$f$
1	0.22	0.11	—	0.26
2	0.07	0.00	0.21	—
3	0.15	0.12	—	—
4	0.09	0.11	—	—
5	—	—	—	0.15
6	—	—	0.15	0.0

поверхности. Визуальный осмотр релаксированной кристаллической решетки показал, что минимумы энергии на недеформированной поверхности (1–4 на рис. 1а) связаны с образованием ад-димеров в положениях  $T_4$ . Эти ад-димеры состоят из адатома в структуре  $7 \times 7$  и дополнительного адсорбированного (диффундирующего) атома Ge. Такое расположение стабильных мест адсорбции соответствует найденному ранее в близкой по свойствам системе Si/Si(111)- $7 \times 7$  [12]. При сжатии поверхности некоторые из этих минимумов исчезают, но вместо них появляются новые (5 и 6 на рис. 1б).

Расчет показал, что энергетические барьеры между отдельными минимумами потенциальной энергии в ячейке  $7 \times 7$  низкие ( $0.2$ – $0.3 \text{ эВ}$ ). Это вызвано высокой концентрацией оборванных связей поверхности в этой области, расположенных на адатомах и рест-атомах. Поэтому при миграции адатома формирование новых связей и обрыв старых происходят одновременно, приводя к низким энергетическим барьерам. Однако для преодоления границ ячейки  $7 \times 7$  для диффузии адатома на большие расстояния ему необходимо пройти довольно высокий барьер, расположенный над рядами димеров по периметру ячеек  $7 \times 7$ . Формирование высокого энергетического барьера в этой области вызвано тем, что все связи в димерах структуры  $7 \times 7$  насыщены и поэтому адатому требуется в значительной степени ослабить связь с поверхностью. Частота перехода адатома ( $\nu$ ) через энергетический барьер ( $E_b$ ), согласно уравнению Аррениуса, экс-



**Рис. 1.** *a, б* — Рельеф поверхности потенциальной энергии  $E(x, y)$  для атома Ge на поверхности Ge(111)-7×7. Контурные линии расположены с шагом 0.2эВ по энергии. Светлые (темные) области соответствуют низкой (высокой) энергии. Элементы структуры 7×7 выделены штриховыми линиями: большие кружки — адатомы, средние — рест-атомы, гантельки — димеры. Пронумерованные точки (*u* или *f*) указывают на места локальных минимумов в бездефектной (*unfaulted*) и дефектной (*faulted*) половинках ячейки 7×7. Светлые линии (L1–L4) указывают положения рассчитанных путей миграции адатома между половинками ячейки 7×7. Сплошная темная линия между минимумами  $2u$  и  $2f$  на рис. *a* — путь с минимальной высотой энергетического барьера (minimum energy path, MEP) для миграции адатома на большие расстояния. *a* — Недеформированная поверхность. *б* — Упруго-сжатая на 4% поверхность. *в, з* — Профили поверхностей потенциальной энергии вдоль линий L1–L4 на недеформированной (*в*) и на упруго-сжатой (*з*) поверхностях Ge(111)-7×7. Для каждой из поверхностей за начало шкалы энергии принята энергия наиболее глубокого минимума ( $2f$  для недеформированной и  $6f$  для упруго-сжатой поверхностей)

пониженно зависит от величины этого барьера  $\nu = \nu_0 \exp(-E_b/k_B T)$ , где  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана, а предэкспоненциальный множитель  $\nu_0$  описывает частоту попыток скачков через энергетический барьер и зависит от локальных колебаний кристаллической решетки. Таким образом, согласно приведенным на рис. 1*a, б* рельефам поверхности потенциальной энергии, адатом будет относительно быстро двигаться в ячейке 7×7, перескакивая между различными локальными минимумами энергии, при этом перескоки в соседние ячейки сверхструктуры 7×7 будут происходить значительно реже. Это явление наблюдалось ранее для других систем [13–20].

На рис. 1*a* можно видеть, что наиболее низкие энергетические барьеры между половинками ячеек 7×7 наблюдаются над атомами димеров, при этом барьер над атомом димера, расположенный вблизи угловой вакансии структуры 7×7, наименьший.

Было найдено, что это вызвано образованием слабых ковалентных связей между адатомом и атомами димера. Интересно, что формирование связи происходит, несмотря на то, что формально все связи в димерах структуры 7×7 замкнуты. Действительно, на рис. 2*a* можно видеть, что при адсорбции адатома Ge над атомом димера между ними имеется электронная плотность, свидетельствующая об образовании ковалентной связи. На рис. 1*в* показаны рассчитанные профили поверхностей потенциальной энергии вдоль линий L1–L3 на рис. 1*a* над атомами димеров. Видно, что профиль вдоль линии L1 имеет высоту барьера 0.4–0.5эВ, тогда как для линий L2 и L3 высота барьера составляет 0.7–0.8эВ. Таким образом, путь с минимальной высотой энергетического барьера (minimum energy path, MEP) для диффузии адатома Ge на большие расстояния проходит вдоль темной кривой, соединяющей минимумы  $2u$  и  $2f$ . Седловая точка этого пути располо-

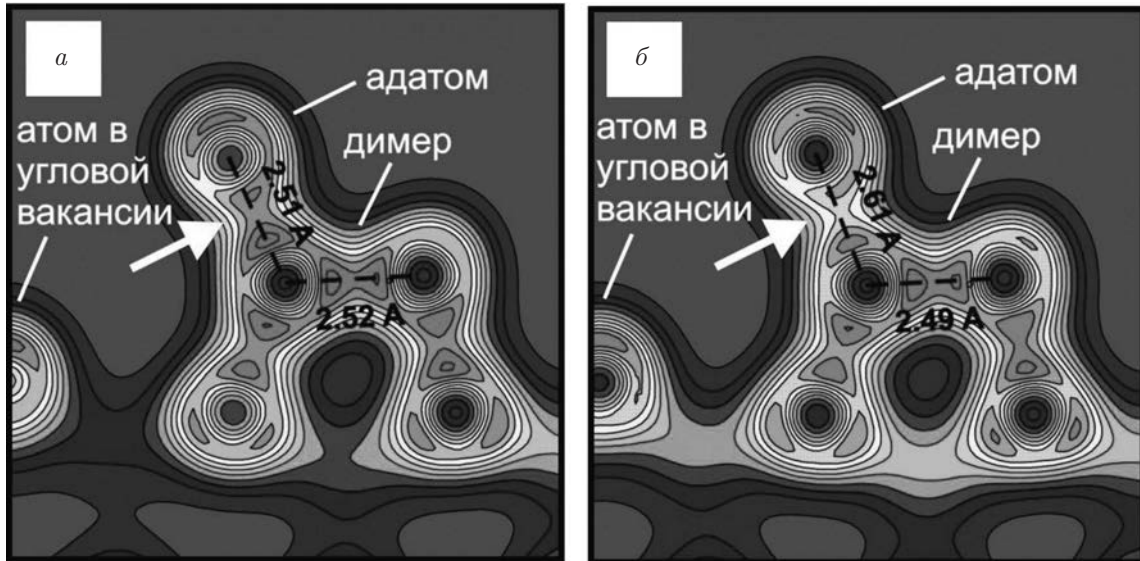


Рис. 2. Вертикальное сечение плотности валентных электронов для адатома Ge, адсорбированного в центре линии L1 на рис. 1 *a, б* (сечение вдоль ряда димеров структуры  $7 \times 7$ ). *a* — Недеформированная поверхность. *б* — Упруго-сжатая на 4% поверхность. Стрелкой показана ковалентная связь, образуемая между адатомом Ge и атомом димера. Длина связей указана в ангстремах

жена над атомом димера вблизи угловой вакансии, а высота барьера определяет энергию активации диффузии.

Может возникнуть вопрос, почему барьеры вдоль линий L2 и L3 на рис. 1*a, б* выше, чем вдоль L1, хотя все линии проходят над атомами димеров. Известно, что связи в димерах структуры  $7 \times 7$  на недеформированной поверхности Ge(111) являются растянутыми по отношению к связям в объеме кристалла [21]. Так, связи в димерах, расположенных вблизи угловых вакансий структуры  $7 \times 7$  длиннее связей в объеме кристалла примерно на 4%, тогда как связи в димерах, расположенных посередине между вакансиями, менее растянуты (около 3%). Кроме того, для атома димера вблизи угловой вакансии наблюдается наибольшее отклонение углов между связями от значения  $109.5^\circ$ , характерного для решетки типа алмаза. Таким образом,  $sp^3$ -гибридизация электронных оболочек атома димера, ближайшего к угловой вакансии, оказывается наиболее сильно искажена и это, вероятно, способствует образованию слабой ковалентной связи с адатомом Ge.

При сжатии поверхности на 4% в латеральном направлении путь МЕР вдоль линии L1 в значительной степени оказывается перекрыт (рис. 1*б*). Действительно, энергетический барьер вдоль L1 на профиле поверхности потенциальной энергии на рис. 1*г* сравним с величиной барьера вдоль линий L2–L4 и составляет примерно 0.8 эВ.

Энергетический барьер это разница энергий в седловой точке и в глобальном минимуме поверхности потенциальной энергии. Таким образом, увеличение энергетического барьера вдоль линии L1 на поверхности Ge(111) при ее сжатии может быть вызвано как образованием более прочных связей в глобальном минимуме *6f* в ячейке  $7 \times 7$  (таблица), так и ослаблением связи адатома с поверхностью в седловой точке при адсорбции на атоме димера (или оба этих фактора вместе). Здесь, однако, имеется трудность, связанная с тем, что энергии адатома Ge на недеформированной и упруго-сжатой поверхностях Ge(111)- $7 \times 7$  нельзя сравнить непосредственно. Для решения этой проблемы мы привязали рассчитанные энергии к общему уровню вакуума. Таким образом, были рассчитаны энергии адсорбции адатома Ge на глобальных минимумах энергии в ячейке  $7 \times 7$  и седловых точках вдоль линий L1. Было найдено, что энергия адсорбции в глобальных минимумах энергии приблизительно одинакова для недеформированной и упруго-сжатой поверхностей. Напротив, энергия адсорбции в седловой точке L1 для упруго-сжатой поверхности Ge(111) ниже, чем для недеформированной, примерно на 0.28 эВ. Следовательно, увеличение энергетического барьера вдоль L1 при сжатии поверхности вызвано ослаблением связи адатома Ge с поверхностью в седловой точке (над атомом димера).

Рисунок 2*б* иллюстрирует атомный механизм этого явления. Сжатие поверхности Ge(111) приво-

дит к сокращению длины изначально растянутой связи между атомами димера. Таким образом, длина этой связи становится ближе к равновесной для объема Ge. Это сопровождается увеличением длины связи между адатомом Ge и атомом димера. Сокращение/увеличение длины связи означает усиление/ослабление соответствующих атомных связей. На рис. 2б можно видеть, что этот процесс сопровождается перераспределением электронной плотности от слабеющей  $\sigma$ -связи между атомами к той, которая становится сильнее.

Из общих соображений понятно, что рассмотренная в этой работе картина диффузии мономеров будет справедлива при небольшой концентрации адсорбированных адатомов Ge, когда каждый диффундирующий атом можно рассматривать независимо. Изучение диффузии кластеров адатомов на поверхности с помощью расчетов на основе теории функционала плотности представляет в настоящий момент очень сложную задачу, требующую огромных затрат процессорного времени. Ранее в нескольких экспериментальных работах обсуждался вклад «магических» кластеров Si, образующихся на поверхности Si(111)- $7 \times 7$ , в самодиффузию и гомоэпитаксиальный рост [22–24]. Однако в работе Черепанова и Фойхтлендера [4] показано, что вклад «магических» кластеров Ge в диффузию и формирование двумерных островков на поверхности Ge(111) в диапазоне температур 400–700 К отсутствует. Этот вывод сделан на основании того, что плотность «магических» кластеров на поверхности Ge(111) со структурой  $7 \times 7$  намного выше, чем на той же поверхности со структурой  $5 \times 5$ , однако при этом концентрация двумерных островков, образующихся в процессе роста Ge, не зависит от структуры поверхности.

Согласно изложенному выше механизму образования энергетических барьеров на границе ячеек структуры  $7 \times 7$ , близкий по величине барьер должен наблюдаться на границе ячеек  $5 \times 5$ . Это происходит из-за локального характера взаимодействия адатома с поверхностью, с одной стороны, и одинаковой локальной атомной структурой в реконструкциях  $5 \times 5$  и  $7 \times 7$ , с другой. Таким образом, теоретические данные, изложенные выше, согласуются как с отсутствием зависимости скорости диффузии германия от структуры поверхности Ge(111), так и с увеличением энергетического барьера при сжатии поверхности, полученными из эксперимента [4]. Эти факты, а также выводы об отсутствии вклада «магических» кластеров Ge в диффузию и формирование двумерных островков на поверхности Ge(111), сделанные в работе Черепанова и Фойхтлендера [4],

свидетельствуют в пользу того, что на поверхности Ge(111)- $7 \times 7$  имеет место диффузия мономеров Ge.

#### 4. ВЫВОДЫ

Исследовано влияние упругих деформаций поверхности Ge(111)- $7 \times 7$ , возникающих при росте Ge на подложке Si(111), на диффузию атомов Ge. Показано, что скорость диффузии адатома Ge по недеформированной поверхности Ge(111)- $7 \times 7$  определяется энергетическим барьером, расположенным на границе ячеек  $7 \times 7$  над атомами димеров вблизи угловых вакансий структуры  $7 \times 7$ . Установлено, что сжатие поверхности усиливает связи между атомами димеров структуры  $7 \times 7$ . Это приводит к ослаблению связи между димером и адатомом из-за перераспределения электронной плотности от этой связи к связи между атомами димера. Ослабление связи адатома Ge с поверхностью влечет за собой увеличение энергии активации диффузии. Результаты работы могут найти применение для оптимизации процессов роста тонких пленок и наноструктур Ge на поверхности Si.

**Благодарности.** Автор выражает благодарность информационно-вычислительному центру НГУ за предоставление доступа к вычислительным ресурсам кластера.

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-72-30023).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. H. Brune, K. Bromann, H. Röder, K. Kern, J. Jacobsen, P. Stoltze, K. Jacobsen, and J. Nørskov, *Phys. Rev. B* **52**, R14380(R) (1995).
2. C. Ratsch, A. P. Seitsonen, and M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **55**, 6750 (1997).
3. O. P. Pchelyakov, A. V. Dvurechensky, A. V. Latyshev, and A. L. Aseev, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 014027 (2010).
4. V. Cherepanov and B. Voigtländer, *Phys. Rev. B* **69**, 125331 (2004).
5. V. Cherepanov and B. Voigtländer, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 4745 (2002).
6. K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi, and M. Takahashi, *Surf. Sci.* **164**, 367 (1985).

7. H. J. Gossmann, J. C. Bean, L. C. Feldman, E. G. McRae, and I. K. Robinson. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1106 (1985).
8. R. Zhachuk, S. Teys, and J. Coutinho, *J. Chem. Phys.* **138**, 224702 (2013).
9. J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sanchez-Portal, *J. Phys. Condens. Matter* **14**, 2745 (2002).
10. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
11. P. A. Жачук, С. А. Тийс, Б. З. Олышанецкий, *ЖЭТФ* **140**, 1113 (2011).
12. C. M. Chang and C. M. Wei, *Phys. Rev. B* **67**, 033309 (2003).
13. R. Zhachuk, S. Teys, B. Olshanetsky, and S. Pereira, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 061901 (2009).
14. T. Sato, S. I. Kitamura, and M. Iwatsuki, *Surf. Sci.* **445**, 130 (2000).
15. H. Uchida, T. Kuroda, F. B. Mohamad, J. Kim, K. Kashiwagi, K. Nishimura, and M. Inoue, *Phys. Stat. Sol.* **241**, 1665 (2004).
16. L. Vitali, M. G. Ramsey, and F. P. Netzer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 316 (1999).
17. O. Custance, I. Brihuega, J. M. Gómez-Rodríguez, and A. M. Baró, *Surf. Sci.* **482–485**, 1406 (2001).
18. O. Custance, S. Brochard, I. Brihuega, E. Artacho, J. M. Soler, A. M. Baró, and J. M. Gómez-Rodríguez, *Phys. Rev. B* **67**, 235410 (2003).
19. J. Mysliveček, P. Sobotík, I. Ošťádal, T. Jarolímek, and P. Šmilauer, *Phys. Rev. B* **63**, 045403 (2001).
20. C. Polop, E. Vasco, J. A. Martín-Gago, and J. L. Sacedón, *Phys. Rev. B* **66**, 085324 (2002).
21. А. Е. Долбак, P. A. Жачук, *ЖЭТФ* **160**, 55 (2021).
22. I. S. Hwang, M. S. Ho, and T. T. Tsong, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 120 (1999).
23. I. S. Hwang, M. S. Ho, and T. T. Tsong, *Surf. Sci.* **514**, 309 (2002).
24. M. S. Ho, I. S. Hwang, and T. T. Tsong, *Surf. Sci.* **564**, 93 (2004).



# ВЛИЯНИЕ АМПЛИТУДЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА КИНЕТИКУ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

А. Ю. Зубарев, Л. Ю. Исакова, А. Ю. Мусихин\*

Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина  
620002, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 17 января 2024 г.,  
после переработки 6 февраля 2024 г.  
Принята к публикации 6 февраля 2024 г.

Теоретически исследовано влияние амплитуды магнитного поля на кинетику перемагничивания, а также магнитогипертермический эффект, продуцируемый однодоменной ферромагнитной частицей, иммобилизованной в немагнитной среде. Результаты расчетов, основанные на математически регулярной теории Крамерса, показывают, что в частице диссипация  $W$  энергии переменного магнитного поля может расти с амплитудой поля  $H_0$  быстрее, чем по квадратичному закону  $W \sim H_0^2$ . Этот вывод, по крайней мере, в принципиальном отношении объясняет недавние эксперименты по магнитной гипертермии в системах бездвиженных частиц, где была обнаружена зависимость  $W \sim H_0^\gamma$ ,  $\gamma > 2$ .

DOI: 10.31857/S0044451024080091

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Композитные системы, состоящие из магнитных наночастиц, внедренных в несущую немагнитную среду, притягивают большой интерес исследователей и практиков благодаря богатому набору уникальных физических свойств, находящих активное применение во многих современных и перспективных промышленных и био-медицинских технологиях. Обзоры работ по этой тематике можно найти, например, в [1–5]. В частности, магнитно-гипертермический метод терапии онкологических заболеваний основан на внедрении магнитных наночастиц в диагностированную опухолевую область и нагрев этих частиц переменным магнитным полем до температур (как правило, выше 41–42°C), при которых опухолевые клетки погибают [6–14]. Первая теоретическая работа [15] по магнитной гипертермии основана на феноменологическом уравнении Дебая перемагничивания магнитных наночастиц в приближении линейной зависимости намагниченности частиц от внешнего поля. Рассматривались случаи частиц, иммобилизованных во внешней среде, а также частиц, свободно вращающихся в вязкой жидкости. В работах [16] кинетика перемагничивания иммобили-

зованных ферромагнитных частиц исследовалась методами статистической физики на основе уравнения Фоккера–Планка для функции распределения по ориентациям магнитного момента частицы. Приведены оценки времени релаксации намагниченности частицы в постоянном магнитном поле. Теоретические исследования кинетики перемагничивания неподвижной частицы в переменном поле проводились в [17] при произвольных значениях параметра магнитной анизотропии и амплитуды поля. В рамках этого подхода для определения статистически средней намагниченности частицы необходимо решать, строго говоря, бесконечную систему зацепляющихся дифференциальных уравнений, обоснование возможности обрыва которой с сохранением конечного числа уравнений представляет собой отдельную задачу. Анализ показывает, что количество уравнений в системе, которое необходимо сохранить, чтобы получить результаты с приемлимой точностью, быстро растет при увеличении параметра магнитной анизотропии частицы и амплитуды магнитного поля. Поэтому актуальной остается задача о выводе компактных, достаточно удобных уравнений кинетики перемагничивания частицы, пусть даже при определенных ограничениях на физические параметры системы.

Одна из важнейших характеристик магнитной гипертермии как физического явления — зависимость интенсивности  $W$  диссипации энергии маг-

\* E-mail: antoniusmagna@yandex.ru

нитного поля (интенсивность генерирования тепла) от частоты и амплитуды магнитного поля. Для малых амплитуд  $H_0$  поля, при которых выполняется приближение линейной зависимости намагниченности от поля, справедливо соотношение  $W \sim H_0^\gamma$ . Увеличение поля ведет к более медленной, чем линейная, зависимости намагниченности системы частиц от поля, поэтому естественно ожидать, что это должно вести к более медленной, чем квадратичная, зависимости диссипации энергии от амплитуды поля. Однако неожиданно недавние эксперименты [18] показали более быструю, чем квадратичная, зависимость  $W \sim H_0^\gamma$ ,  $\gamma > 2$ .

Целью этой работы является, во-первых, вывод компактного, удобного для использования уравнения кинетики перемагничивания ферромагнитной частицы в переменных полях, которое может быть использовано в достаточно широком диапазоне амплитуд поля. Во-вторых, на основе этого уравнения показать, что более быстрая, чем квадратичная, зависимость интенсивности  $W$  диссипации энергии от амплитуды переменного поля  $H_0$ , вполне возможна и не является следствием методических или других ошибок эксперимента.

С этой целью мы рассмотрим однодоменную одноосную ферромагнитную частицу, иммобилизованную в немагнитной среде. Отметим, что иммобилизация магнитных наночастиц часто имеет место, например, при их внедрении в биологические ткани [19, 20]. Мы ограничиваемся анализом сильной магнитной анизотропии частицы, т. е. энергия этой анизотропии предполагается намного больше тепловой энергии системы. Поскольку, как известно, энергия магнитной анизотропии пропорциональна объему частицы, это означает, что размер частицы не очень мал. Например, можно показать, что для магнетитовых частиц, часто используемых в экспериментах и приложениях, энергия магнитной анизотропии превышает тепловую энергию при комнатных температурах, когда диаметр частицы больше 16–18 нм (оценки физических характеристик магнетитовых частиц можно найти, например, в [21]). Заметим, что особенности поверхности наночастицы могут вносить дополнительный вклад в энергию ее магнитной анизотропии. Поэтому в реальности приближение сильной анизотропии может выполняться и для частиц с диаметром заметно меньшим указанных 16–18 нм. Наконец, мы будем пренебрегать гиромангнитными эффектами, которые проявляются только при высоких частотах поля (порядка гигагерц), существенно превышающих диапазон, допустимый для многих технологических приложений.

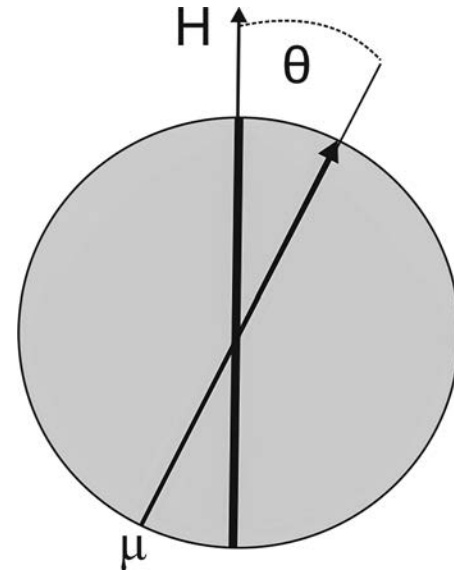


Рис. 1. Иллюстрация рассматриваемой частицы. Толстая линия — ось легкого намагничивания частицы

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

Рассмотрим неподвижную ферромагнитную частицу (см. иллюстрацию на рис. 1), помещенную в осциллирующее магнитное поле, параллельное оси легкого намагничивания частицы. Отметим, что в экспериментах «in-vitro» направление осей легкого намагничивания частиц может быть зафиксировано вдоль выбранного направления, если полимеризацию магнитного композита проводить в достаточно сильном постоянном поле.

Обозначим  $\mu$  — единичный вектор, направленный вдоль магнитного момента частицы (см. рис. 1) и  $f(\mu)$  — нормализованную на единицу функцию распределения (плотность вероятности) по ориентациям вектора  $\mu$ . Эта функция может быть найдена как решение уравнения Фоккера–Планка, которое с учетом осевой симметрии задачи может быть записана в виде [16, 17, 22]

$$2\tau_D \frac{\partial f}{\partial \tau} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} j. \quad (1)$$

Здесь  $j$  — плотность потока вероятности в пространстве  $\mu$ :

$$j(\theta) = -\sin \theta \left( f \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) = -\sin \theta e^{-u} \frac{\partial}{\partial \theta} (f e^u). \quad (2)$$

Параметр  $\tau_D$  — характерное время вращательной диффузии магнитного момента частицы, определяе-

мое ее внутренней кристаллической структурой;  $\theta$  — полярный угол отклонения вектора  $\mu$  от оси магнитной анизотропии частицы (следовательно, от направления осциллирующего поля, см. рис. 1);  $u$  — безразмерная, по отношению к абсолютной температуре  $k_B\Theta$  энергия частицы,  $\Theta$  — абсолютная температура в кельвинах. Энергия  $u$  может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} u &= -\sigma \cos^2 \theta - h \cos \theta, \\ h &= \mu_0 \frac{m}{k_B\Theta} H, \quad \sigma = \frac{K v_p}{k_B\Theta}, \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\mu_0$  — магнитная проницаемость вакуума;  $m$  — абсолютное значение магнитного момента частицы;  $k$  — параметр магнитной анизотропии частицы;  $v_p$  и  $d_p$  — объем и диаметр частицы;  $h$  — отношение энергии Зеемана взаимодействия частицы с магнитным полем  $H$  к тепловой энергии  $k_B\Theta$ , которое может рассматриваться как безразмерное магнитное поле;  $\sigma$  — безразмерный параметр магнитной анизотропии частицы. Отметим, что для магнетитовых частиц, обычно используемых в медико-биологических приложениях, по порядку величины  $\tau_D \sim 10^{-9}$  с (см., например, [21]).

В общем случае решение уравнения (1) в конечной аналитической форме не получено. Здесь рассмотрим случай сильной магнитной анизотропии, когда выполняются сильные неравенства  $\sigma \gg 1$ ,  $\sigma \gg h$ . Отметим, что никаких других ограничений на величину магнитного поля не предполагается.

В рамках принятых приближений в пространстве  $\mu$  существуют две потенциальные ямы, разделенные потенциальным барьером, т.е. функция  $u(\theta)$  при  $0 \leq \theta \leq \pi$  имеет два минимума и один максимум.

Минимумы потенциала  $u$  соответствуют  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi$ ; они равны соответственно

$$\begin{aligned} u_0 &= -\sigma - h, \\ u_\pi &= -\sigma + h. \end{aligned} \quad (4)$$

Значение  $\theta_{max}$  угла  $\theta$ , соответствующее максимуму  $u$ , определяется из уравнения  $\cos \theta_{max} = -h/2\sigma$ ; значение потенциала в точке максимума равно

$$u_{max} = \frac{h^2}{4\sigma}. \quad (5)$$

Введем вероятности  $P_0$  и  $P_\pi$  того, что вектор  $\mu$  принадлежит потенциальным ямам  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  и

$\pi/2 \leq \theta \leq \pi$  соответственно. Они могут быть определены следующим образом:

$$\begin{aligned} P_0 &= \int_0^{\theta_{max}} f(\theta) \sin \theta d\theta, \\ P_\pi &= \int_0^{\theta_{max}} f(\theta) \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (6)$$

Очевидно, условие нормировки  $P_0 + P_\pi = 1$  должно выполняться. Для того чтобы найти  $P_0$ , проинтегрируем обе части уравнения (1) так же, как в первом интеграле (6). После простых преобразований получаем

$$2\tau_D \frac{\partial P_0}{\partial t} = -j(\theta_{max}). \quad (7)$$

Для того чтобы найти  $j(\theta_{max})$ , мы будем использовать основные идеи классической теории Крамерса диффузии броуновской частицы через потенциальный барьер (см. также [23]). Следуя этому методу, перепишем уравнение (2) в виде

$$j(\theta) \frac{e^u}{\sin \theta} = -\frac{\partial}{\partial \theta} (f e^u) \quad (8)$$

и проинтегрируем обе части (8) по  $\theta$  от 0 до  $\pi$ :

$$\begin{aligned} \int_0^\pi j(\theta) \frac{e^u}{\sin \theta} d\theta &= -[f_\pi e^{u_\pi} - f_0 e^{u_0}], \\ f_0 &= f(0), \quad f_\pi = f(\pi). \end{aligned} \quad (9)$$

Поскольку  $\sigma \gg 1$ , функция  $u(\theta)$  вблизи своего максимума имеет форму высокого острого пика:

$$u_{max} - u_{0,\pi} \gg 1, \quad \frac{d^2 u}{d\theta^2} \Big|_{\theta_{max}} \gg 1.$$

Поэтому мы можем оценить интеграл в левой части (9), используя стандартные соображения метода перевала:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi j(\theta) \frac{e^u}{\sin \theta} d\theta &\approx j(\theta_{max}) \frac{e^{u_{max}}}{\sin \theta_{max}} \sqrt{\frac{\pi}{\Omega}}, \\ \Omega &= -\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{d\theta^2} \Big|_{\theta_{max}}. \end{aligned} \quad (10)$$

В линейном приближении по малому отношению  $h/\sigma$  получаем  $\Omega = \sigma$  и  $\sin \theta_{max} = 1$ . Следовательно,

$$\int_0^\pi j(\theta) \frac{e^u}{\sin \theta} d\theta \approx j(\theta_{max}) \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} e^{u_{max}}. \quad (11)$$

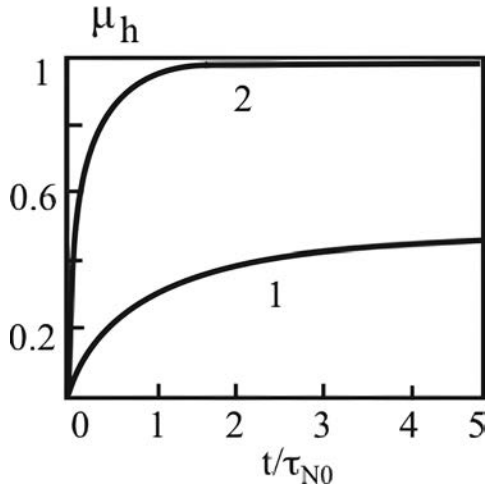


Рис. 2. Статистически средняя проекция  $\mu_h$  вектора  $\mu$  как функция от времени. Цифры возле кривых: 1 —  $h = 0.5$ ; 2 —  $h = 2.5$

Комбинируя (9) и (11), получаем

$$j(\theta_{max}) \approx - \left( \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} e^{u_{max}} \right)^{-1} [f_{\pi} e^{u_{\pi}} - f_0 e^{u_0}]. \quad (12)$$

Используя (12) в уравнении (7), учитывая соотношения (4) и (5), меняя для упрощения записи знак приближенного равенства « $\approx$ » на знак равенства « $=$ », в рамках приближения  $\sigma \gg 1$  приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_0}{\partial t} &= \frac{1}{2\tau_I} [f_{\pi} e^h - f_0 e^{-h}], \\ \tau_I &= \tau_D \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} \exp \left\{ \sigma + \frac{h^2}{4\sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Определим теперь связь между вероятностью  $P_0$  и значениями  $f_0, f_{\pi}$  плотности вероятности  $f$  в точках  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi$  минимумов потенциала  $u$ . Для этого, как и в классической теории Крамерса, учтем, что переход вектора  $\mu$  через высокий потенциальный барьер — сравнительно редкое явление, и характерное время между двумя такими переходами намного больше времени установления термодинамического равновесия в каждой из потенциальных ям, совпадающим с  $\tau_D$  по порядку величины. Поэтому в каждый момент времени мы можем рассматривать состояние внутри такой ямы как практически равновесное, описываемое функцией распределения Больцмана. Очевидно, это не означает равновесного распределения между потенциальными ямами. Таким образом, в каждой из потенциальных ям  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  и  $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$ , в соответствии распределением Больцмана имеем

$$f(\theta) = f_0 \exp\{u_0 - u(\theta)\} \quad (14)$$

и

$$f(\theta) = f_{\pi} \exp\{u_{\pi} - u(\theta)\}. \quad (15)$$

Подставляя (14) в первое соотношение (6), получаем

$$\begin{aligned} P_0 &= f_0 \int_0^{\theta_{max}} \exp\{u_0 - u(\theta)\} \sin \theta d\theta = \\ &= f_0 \int_0^{\theta_{max}} \exp\{-\sigma(1 - \cos^2 \theta)\} \exp\{-h(1 - \cos \theta)\} \times \\ &\quad \times \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (16)$$

Поскольку  $\sigma \gg 1$ , функция  $\exp\{-\sigma(1 - \cos^2 \theta)\}$  имеет острый максимум при  $\theta = 0$ . В силу неравенства  $\sigma \gg h$  экспонента  $\exp\{-h(1 - \cos \theta)\}$  меняется с  $\theta$  намного медленнее, чем  $\exp\{-\sigma(1 - \cos^2 \theta)\}$ . Следовательно, используя метод перевала, мы можем представить

$$\begin{aligned} P_0 &\approx f_0 \int_0^{\theta_{max}} \exp\{-\sigma\theta^2\} \theta d\theta = \\ &= f_0 \frac{1}{2\sigma} (1 - \exp\{\sigma\theta_{max}^2\}) \approx f_0 \frac{1}{2\sigma}. \end{aligned} \quad (17)$$

Аналогично

$$P_{\pi} \approx f_{\pi} \frac{1}{2\sigma}. \quad (18)$$

Ниже для удобства в уравнениях (17) и (18) мы будем использовать знак равенства « $=$ » вместо приближенного равенства « $\approx$ ».

В силу условия нормировки  $P_0 + P_{\pi} = 1$ , используя (17) и (18), приходим к равенству

$$f_0 + f_{\pi} = 2\sigma. \quad (19)$$

Комбинируя соотношения (17), (18) и (19) с (13), получаем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_{II}} [\sigma e^h - f_0 \operatorname{ch} h], \\ \tau_{II} &= 2 \frac{\tau_I}{\sigma} = 2\tau_D \sqrt{\frac{\pi}{\sigma^3}} e^{\sigma + \frac{h^2}{4\sigma}}. \end{aligned} \quad (20)$$

Статистически средняя проекция единичного вектора  $\mu$  на направление поля  $\mathbf{H}$  может быть рассчитана следующим образом:

$$\mu_h = \mu_{h0} + \mu_{h\pi}, \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \mu_{h0} &= \int_0^{\theta_{max}} f(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta, \\ \mu_{h\pi} &= \int_{\theta_{max}}^{\pi} f(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (22)$$

Учитывая (14), (15) и (19), уравнение (22) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \mu_{h0} &= \\ &= f_0 \int_0^{\theta_{max}} \exp \{-\sigma (1 - \cos^2 \theta)\} \exp \{-h(1 - \cos \theta)\} \times \\ &\quad \times \cos \theta \sin \theta d\theta \approx f_0 \frac{1}{2\sigma}, \end{aligned} \quad (23a)$$

$$\begin{aligned} \mu_{h\pi} &= \\ &= f_{\pi} \int_{\theta_{max}}^{\pi} \exp \{-\sigma (1 - \cos^2 \theta)\} \exp \{h(1 + \cos \theta)\} \times \\ &\quad \times \cos \theta \sin \theta d\theta \approx -f_{\pi} \frac{1}{2\sigma}. \end{aligned} \quad (23b)$$

Здесь, как и в (17), (18), снова использован метод седловой точки оценки определенных интегралов. Подставляя (21), (23) в (20), приходим к уравнению

$$\frac{\partial \mu_h}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{II}} [\text{sh } h - \mu_h \text{ch } h] \quad (24)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_h}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_N} [\text{th } h - \mu_h], \\ \tau_N &= \frac{\tau_{II}}{\text{ch } h} = \tau_{N0} \frac{e^{\frac{h^2}{4\sigma}}}{\text{ch } h}, \\ \tau_{N0} &= 2\tau_D \sqrt{\frac{\pi}{\sigma^3}} e^{\sigma}. \end{aligned} \quad (25)$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Если  $h$  не зависит от времени, например, после ступенчатого изменения поля, параметр  $\tau_N$  постоянен и играет роль характерного времени неелевской релаксации  $\mu_h$  к его равновесному значению  $\text{th } h$ ;  $\tau_{N0}$  является значением  $\tau_N$  при  $h = 0$ . Полученная оценка  $\tau_{N0}$  совпадает с таковой, полученной в (23) в пределе очень высокой магнитной анизотропии частицы. Как видно из (25),  $\tau_N$  уменьшается с ростом магнитного поля  $h$  (напомним, предполагается выполнение сильного неравенства  $h \ll \sigma$ ), что соответствует выводам [16, 17].

Когда  $h$  меняется со временем  $t$ , величина  $\tau_N$  зависит от  $t$  и не может рассматриваться как время релаксации. Некоторые результаты расчетов  $\mu_h(t)$  после ступенчатого изменения  $h$  от нуля до некоторых постоянных значений представлены на рис. 2. Увеличение конечного значения поля  $h$  приводит к более быстрой релаксации  $\mu_h$  к его равновесному значению. Заметим, что после выключения поля время релаксации  $\mu_h$  к нулю будет равно  $\tau_{N0}$ , т.е. больше времени релаксационного процесса при увеличении поля. Таким образом, процессы намагничивания системы после увеличения поля и размагничивания после его уменьшения (выключения), вообще говоря, характеризуются разными временами релаксации.

Рассмотрим теперь случай осциллирующего поля  $h = h_0 \cos \omega t$ , где  $h_0 \ll \sigma$  — его амплитуда. Решение (24) при начальном условии  $\mu_h = 0$  при  $t = 0$  имеет вид

$$\begin{aligned} \mu_h(t) &= \frac{V(t)}{\tau_{N0}} \int_0^t \frac{\text{sh}(h_0 \cos \omega t')}{V(t')} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \left( -\frac{(h_0 \cos \omega t')^2}{4\sigma} \right) \right\} dt', \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} V(t) &= \exp \left\{ \left( -\frac{1}{\tau_{N0}} \int_0^t \exp \left\{ \left( -\frac{(h_0 \cos \omega t')^2}{4\sigma} \right) \right\} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \text{ch}(h_0 \cos \omega t') dt' \right) \right\}. \end{aligned}$$

Мы определим эффективную комплексную восприимчивость  $\chi$  на частоте сигнала следующим образом:

$$\begin{aligned} \chi'(\omega, h_0) &= \frac{1}{h_0} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mu_h \cos \omega t dt, \\ \chi''(\omega, h_0) &= \frac{1}{h_0} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mu_h \sin \omega t dt. \end{aligned} \quad (27)$$

Заметим, что определенная таким образом восприимчивость определяет связь между средним вектором  $\mu_h$  ориентации магнитного момента частицы и безразмерным полем  $h$ .

Измеряемая восприимчивость материала, связывающая намагниченность всего композита и размерное поле  $H$ , пропорциональна  $\chi$  с коэффициентом

$$\mu_0 \frac{m^2}{v_p k_B T} \varphi,$$

где  $\varphi$  — объемная концентрация частиц.

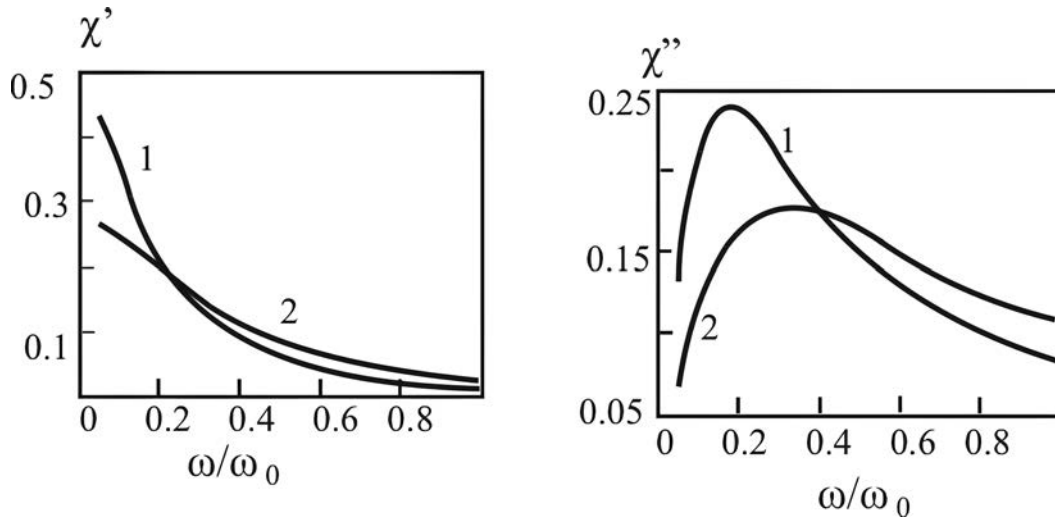


Рис. 3. Действительные и мнимые части эффективной восприимчивости  $\chi$  в зависимости от угловой частоты поля  $\omega$ . Цифры возле кривых: 1 —  $h_0 = 0.5$ ; 2 —  $h_0 = 2$ . Параметр  $\omega_0 = 2\pi/\tau_{N0}$

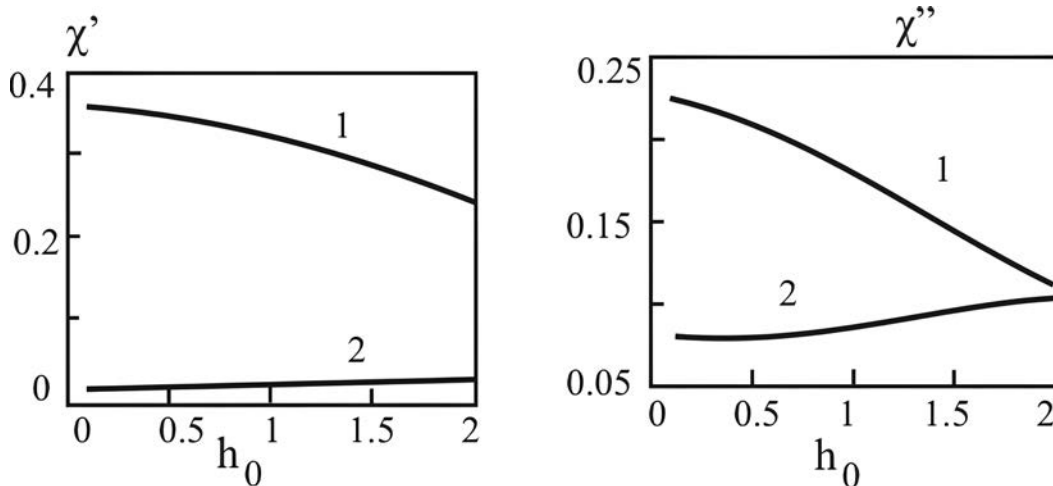


Рис. 4. Действительная и мнимая части эффективной восприимчивости  $\chi$  в зависимости от амплитуды  $h_0$  осциллирующего поля. Кривые: 1 —  $\omega = 0.1$ ; 2 —  $\omega = \omega_0$ . Параметр  $\omega_0$  тот же, что на рис. 3

Некоторые результаты расчетов  $\chi'$  и  $\chi''$  приведены на рис. 3 и 4.

Обе части  $\chi'$  и  $\chi''$  восприимчивости уменьшаются с амплитудой  $h_0$  поля, когда угловая частота  $\omega$  существенно меньше  $\omega_0$ , и увеличиваются при относительно высоких значениях  $\omega$ . Насколько нам известно, ранее это обстоятельство в литературе не отмечалось.

Хорошо известно, что переменное магнитное поле  $\mathbf{H}$  вызывает нагрев ферромагнитных частиц, используемый, в частности, для терапии онкологических заболеваний (метод магнитной гипертермии). Физическая причина этого нагрева состоит в диссипации энергии магнитного поля при перемагничивании частицы.

Среднее значение энергии диссипации за время  $T \gg \{2\pi/\omega, \tau_{N0}\}$  может быть определено из общих термодинамических соображений (см, например, [15]):

$$W = -\mu_0 \frac{m}{T} \int_0^T \mu_h \frac{dH}{dt} dt. \tag{28}$$

Используя обозначения (3) и  $H = H_0 \cos \omega t$ , легко получаем

$$W = \frac{k_B \Theta}{\tau} w, \quad w = h_0 \omega \frac{\tau_{N0}}{T} \int_0^T \mu_h \sin \omega t dt, \tag{29}$$

$$h_0 = \mu_0 \frac{m}{k_B \Theta} H_0,$$

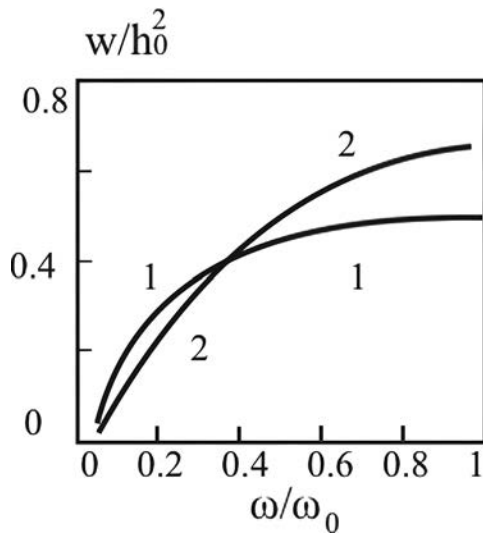


Рис. 5. Безразмерная интенсивность генерирования тепла в частицы в зависимости от угловой частоты поля. Кривые: 1 —  $h_0 = 0.5$ ; 2 —  $h_0 = 2$ . Параметр  $\omega_0$  тот же, что на рис. 3, 4

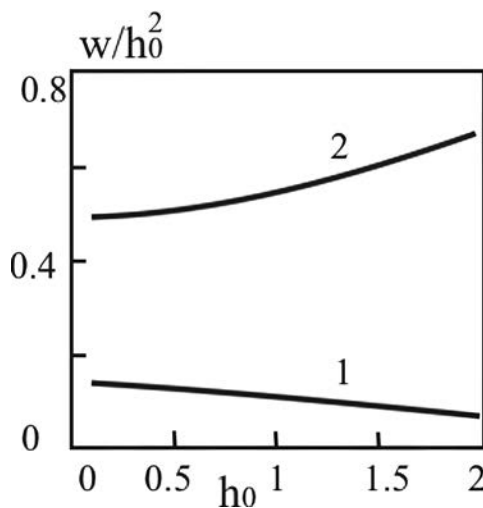


Рис. 6. Зависимость безразмерной интенсивности диссипации энергии  $w$  от безразмерной амплитуды  $h_0$  магнитного поля. Кривые 1 и 2 —  $\omega = 0.1\omega_0$  и  $\omega = \omega_0$ . Параметр  $\omega_0$  тот же, что на рис. 3

где  $w$  — безразмерная интенсивность диссипации энергии (интенсивность генерирования тепла) в частице.

Некоторые результаты расчетов  $w$  как функции от частоты поля  $\omega$  показаны на рис. 5.

Как видно, при относительно больших частотах  $w$  растет с амплитудой поля быстрее, чем по закону  $w \sim h_0^2$ . При стремлении  $\omega$  к бесконечности,  $w$  стремится к некоторому насыщению. Это хорошо известный результат в теории магнитной гипертермии.

Некоторые результаты зависимости отношения  $w/h_0^2$  от  $h_0$  приведены на рис. 6.

Этот рисунок также показывает более быструю, чем  $H_0^2$  зависимость  $W$  от  $H_0$ , когда частота поля достаточно велика. Отметим, что скейлинговая зависимость  $W \sim H_0^\gamma$ ,  $\gamma > 2$  в композитах с иммобилизованными магнитными частицами была обнаружена в экспериментах [18]. Таким образом, проведенный теоретический анализ показывает, что рост интенсивности тепловыделения с амплитудой поля быстрее, чем по квадратичному закону, физически возможен и не может рассматриваться как результат методической ошибки эксперимента.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически рассмотрена кинетика перемагничивания и выделение тепла в полностью неподвижной однодоменной ферромагнитной частице под действием осциллирующего магнитного поля. Предполагалась высокая магнитная анизотропия частицы, что довольно типично как для многих экспериментов, так и для технологических применений нанодисперсных магнитных композитов.

Наши расчеты, основанные на математически последовательной теории Крамерса броуновской диффузии через высокий потенциальный барьер, показали, что скорость диссипации магнитной энергии  $W$ , как и ожидалось, зависит от амплитуды поля  $H_0$  медленнее, чем по закону  $W \sim H_0^2$ , когда частота поля относительно мала. Когда частота превышает некоторую пороговую величину, функция  $W(H_0)$  меняется быстрее, чем  $H_0^2$ . Этот вывод объясняет, по крайней мере, качественно, недавние экспериментальные результаты [18], в которых было получено скейлинговое соотношение

$$W \sim H_0^\gamma, \quad \gamma > 2.$$

Нами рассмотрен случай параллельной ориентации магнитного поля и оси легкого намагничивания частицы. В рамках приближения  $\sigma \gg 1$ ,  $\sigma \gg h$  не представляет принципиального труда рассмотреть случай произвольного угла  $\beta$  между этими векторами. Для этого достаточно в полученных здесь соотношениях заменить безразмерное поле  $h$  на  $h \cos \beta$  в пренебрежении малой компонентой намагниченности в направлении, перпендикулярном оси анизотропии частицы.

**Финансирование.** Работа поддержана грантом Министерства науки и образования РФ, проект FEUZ 2023-0020.

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. Boczkowska and S.F. Awietjan, *Tuning Active Magnetorheological Elastomers for Damping Applications*, Materials Science Forum **636–637**, 766 (2010).
2. M. T. Lopez-Lopez, G. Scionti, A. C. Oliveira et al., *Generation and Characterization of Novel Magnetic Field-Responsive Biomaterials*, PLoS ONE **10**, 7 (2015).
3. B. Sung, M-H. Kim, and L. Abelmann, *Magnetic Microgels and Nanogels: Physical Mechanisms and Biomedical Applications*, Bioengineering and Translational Medicine **6**, 1 (2021).
4. M. Imran, A. M. Affandi, M. Alam et al., *Advanced Biomedical Applications of Iron Oxide Nanostructures Based Ferrofluids*, Nanotechnology **32**, 42 (2021).
5. M. Naghdi, M. Ghovvati, and N. Rabiee, *Magnetic Nanocomposites for Biomedical Applications*, Advances in colloid and interface science **308**, 10277 (2022).
6. A. Sharma, A. Jangam, and J. Low Yung Shen, *Design of a Temperature-Feedback Controlled Automated Magnetic Hyperthermia Therapy Device*, Frontiers in Thermal Engineering **3**, 1131262 (2023).
7. X. Liu, Y. Zhang, Y. Wan et al., *Comprehensive Understanding of Magnetic Hyperthermia for Improving Antitumor Therapeutic Efficacy*, Theranostics **10**, 8 (2020).
8. A. Wlodarczyk, S. Gorgon, A. Radon et al., *Magnetite Nanoparticles in Magnetic Hyperthermia and Cancer Therapies: Challenges and Perspectives*, Nanomaterials **12(11)**, 1807 (2022).
9. M. Peiravi, H. Eslami, M. Ansari et al., *Magnetic hyperthermia: Potentials and limitations*, J. Indian Chem. Soc. **99**, 1 (2022).
10. J. Pan, Y. Xu, Q. Wu et al., *Mild Magnetic Hyperthermia-Activated Innate Immunity for Liver Cancer Therapy*, J. Amer. Chem. Soc. **143**, 21 (2021).
11. A. Ahmed, E. Kim, S. Jeon et al., *Closed-Loop Temperature-Controlled Magnetic Hyperthermia Therapy With Magnetic Guidance of Superparamagnetic Iron-Oxide Nanoparticles*, Advanced Therapeutics **5**, 2 (2022).
12. H. F. Rodrigues, G. Capistrano, and A. F. Bakuzis, *In Vivo Magnetic Nanoparticle Hyperthermia: A Review on Preclinical Studies, Low-Field Nano-Heaters, Noninvasive Thermometry and Computer Simulations for Treatment Planning*, J. Hyperthermia **37**, 3 (2020).
13. V. Vilas-Boas, C. Flix, and E. Begona, *Magnetic Hyperthermia for Cancer Treatment: Main Parameters Affecting the Outcome of in Vitro and in Vivo Studies*, Molecules **25(12)**, 2874 (2020).
14. D. Chang, M. Lim, J. A. C. M. Goos et al., *Biologically Targeted Magnetic Hyperthermia: Potential and Limitations*, Frontiers in Pharmacology **9**, 831 (2018).
15. R. E. Rosensweig, *Heating Magnetic Fluid With Alternating Magnetic Field*, J. Magn. Magn. Mat. **252**, 370 (2002).
16. Yu. P. Kalmykov, *The Relaxation Time of the Magnetization of Uniaxial Single-Domain Ferromagnetic Particles in the Presence of a Uniform Magnetic Field*, J. Appl. Phys. **96**, 1138 (2004).
17. I. S. Poperechny, Yu. L. Raikher, and V. I. Stepanov, *Dynamic Magnetic Hysteresis in Single-Domain Particles With Uniaxial Anisotropy*, Phys. Rev. B **82**, 17 (2010).
18. A. P. Safronov, A. Yu. Zubarev, A. D. Maximov et al., *Specific Loss Power of Epoxy Composites With Embedded Magnetite Particles*, Europ. Phys. J. Special Topics **231**, 1181 (2022).
19. S. Dutz, M. Kettering, I. Hilger et al., *Magnetic Multicore Nanoparticles for Hyperthermia-Influence of Particle Immobilization in Tumour Tissue on Magnetic Properties*, Nanotechnology **22**, 26 (2011).
20. E. A. P?rigo, G. Hemery, O. Sandre et al., *Fundamentals and Advances in Magnetic Hyperthermia*, Applied Physics Reviews **2**, 4 (2015).
21. S. Odenbach and S. Thurm, *Magnetoviscous Effect in Ferrofluids*, Ferrofluids. Magnetically controllable fluids and their applications, Springer, Berlin (2002).
22. М. А. Марценюк, Ю. Л. Райхер, М. И. Шлиомис, ЖЭТФ **65**, 834 (1973).
23. W. F. Brown, Jr., *Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle*, Amer. Phys. Soc. **130**, 5 (1963).



# МАГНИТНЫЕ И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ДОПИРОВАННЫХ Fe ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ $YBaCuO$ , СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЗОЛЬ–ГЕЛЬ–МЕТОДОМ

К. С. Пигальский<sup>a\*</sup>, А. А. Вишнёв<sup>a</sup>, Н. Н. Ефимов<sup>b</sup>, П. Н. Васильев<sup>b</sup>, А. В. Шабатин<sup>c</sup>,  
Л. И. Трахтенберг<sup>a,d</sup>

<sup>a</sup> Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова  
Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

<sup>b</sup> Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова  
Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

<sup>c</sup> Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина  
Российской академии наук  
119071, Москва, Россия

<sup>d</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова  
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 февраля 2024 г.,  
после переработки 14 марта 2024 г.  
Принята к публикации 14 марта 2024 г.

Для серии допированных железом поликристаллических высокотемпературных сверхпроводников  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$  ( $0 \leq x \leq 0.05$ ), синтезированных с использованием нитратно-цитратного варианта золь–гель-методики, проведены исследования структурных (рентгеновским и электронно-микроскопическим методами) и магнитных (в переменных и постоянных магнитных полях) свойств. Для этих образцов определены зависимости от степени допирования кристаллографических параметров, размеров кристаллитов, температур перехода в сверхпроводящее состояние, а также вид и размах гистерезиса намагниченности в полях до 6 Тл. Рассчитаны полевые зависимости плотности внутрикристаллического критического тока  $J_c$ . Показано, что однородное распределение допанта по объему кристаллитов вследствие применения золь–гель-методики приводит к существенному улучшению функциональных параметров по сравнению с образцами, полученными твердофазным методом. Улучшается микроструктура, что проявляется в увеличении размеров и более четкой границе кристаллитов, а также сужается температурный интервал перехода в сверхпроводящее состояние, увеличиваются размах магнитополевого гистерезиса намагниченности и критический ток. В результате, в золь–гель-образцах при степени допирования железом  $x \approx 0.03$  реализуется эффект увеличения  $J_c$ , превышающий порядок величины.

DOI: 10.31857/S0044451024080108

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Различные методы модификации состава керамических материалов путем замещений в катионных подрешетках широко применяются с целью улучшения их функциональных характеристик.

Примерами могут служить твердые растворы на основе редкоземельных гафнатов с повышенной ионной проводимостью [1, 2], высокоэнтропийные многокомпонентные составы сегнето- и пьезоэлектриков [3–5], редкоземельное допирование материалов для лазерной техники [6]. Катионные замещения оказывают значительное влияние и на свойства высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Интерес к этой тематике связан как с фундаменталь-

\* E-mail: pigalskiy@gmail.com

ными вопросами влияния дефектов на параметры сверхпроводящего состояния при  $d$ -волновой симметрии сверхпроводящего параметра порядка [7, 8], так и с прикладной точки зрения. Как известно, создаваемые допированием локальные искажения структуры являются дополнительными центрами пиннинга и увеличивают плотность внутрикристаллического критического тока ( $J_c$ ) [9]. Для ВТСП  $YBa_2Cu_3O_y$  ( $YBaCuO$ ) влияние на величину  $J_c$  частичного замещения меди в цепочечной плоскости на целый ряд элементов было изучено в [10–12], наибольший эффект увеличения  $J_c$  (примерно в 4 раза) был получен при замещении на Fe, Ga и Mo. Другим видом дефектов, увеличивающим  $J_c$  примерно в два раза, является замещение Ba на Sr в количестве 1–5 % [13].

Особое место в этом ряду занимает иттриевая подрешетка, поскольку допускает не только частичное, но и полное замещение Y на большинство редкоземельных элементов, не оказывающего существенного влияния на величину температуры сверхпроводящего перехода ( $T_c$ ) и другие параметра сверхпроводника [14, 15]. В частности, возникающий при этом пиннинг не приводит к заметному увеличению критического тока. Однако эффект значительного увеличения  $J_c$  был недавно обнаружен при другом типе замещения в иттриевой позиции для серии образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$  ( $0 \leq x \leq 0.05$ ) [16]. Для допированных железом ВТСП  $YBaCuO$ , синтезированных твердофазным методом, было показано, что наиболее эффективной является небольшая величина допирования вблизи  $x = 0.03$ , при которой увеличение  $J_c$  во внешнем магнитном поле 1 Тл достигает порядка величины.

В образцах с катионным допированием важной характеристикой является степень однородности распределения примесных атомов по объему образца. В случае широко используемого твердофазного метода с целью достижения однородности проводится многократное измельчение образца между отжигами. Однако существует ряд других, более эффективных методов синтеза образцов с высокой степенью катионного упорядочения, в основе которых лежит стадия перевода исходных катионов в раствор. Одним из них является золь–гель–процесс, позволяющий создать однородное распределение катионов в геле, а после его стораения получить шихту, состоящую из гомогенной смеси наноразмерных частиц исходных компонентов [17]. Применительно к ВТСП  $YBaCuO$  основное развитие золь–гель–методики было направлено на синтез образцов с малым размером частиц. Был предложен и апробиро-

ван нитратно–цитратный вариант золь–гель–процесса [18], который в дальнейшем использовался и в других работах [19–21].

В настоящей работе изучено влияние степени однородности объемного распределения Fe на свойства ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$ , допированного железом в диапазоне ( $0 \leq x \leq 0.05$ ). С использованием золь–гель–методики на начальной стадии синтеза получены образцы с высокой степенью однородности, определены их структурные, магнитные и сверхпроводящие характеристики и проведено сравнение с соответствующими характеристиками образцов, полученных твердофазным методом.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Первой стадией синтеза каждого состава серии образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$  ( $YFeBaCuO$ ) ( $x = 0, 0.02, 0.03, 0.05$ ) являлся нитратно–цитратный вариант золь–гель–процесса, позволяющий получить высокоомогенную наноразмерную шихту. По сравнению с более ранними работами с целью улучшения свойств шихты технология её получения была модифицирована. Если в работах [17–19] предварительно высушенный гель (при 80°C) сторал в муфельной печи в процессе нагрева до 520°C, то в настоящей работе выпаривание геля продолжали вплоть до его самовоспламенения. После этого из полученной шихты выжигали остатки сажи при  $T = 600^\circ\text{C}$  (2 суток).

Дальнейший синтез образцов из золь–гель–шихты проводился в атмосфере кислорода в несколько этапов. На первом этапе в результате отжига при  $T = 895^\circ\text{C}$  (48 ч.) в порошке и при  $T = 925^\circ\text{C}$  (24 ч.) в спрессованном виде реакция образования конечного соединения  $YFeBaCuO$  протекала практически полностью. Далее образцы медленно нагревались (скорость  $1^\circ\text{C}/\text{ч.}$ ) до  $T = 955^\circ\text{C}$ , при этом происходил интенсивный рост зерен, а плотность увеличивалась до 93 % от рентгеновской. Насыщение образцов кислородом проводилось путем медленного охлаждения в токе кислорода от 920 до 380°C с последующей выдержкой в течение 20 ч. Общее содержание кислорода во всех образцах, определенное методом йодометрического титрования, составило  $y \approx 6.92 \pm 0.03$ .

Референтная серия образцов тех же составов была получена твердофазным методом. Для достижения фазового равновесия стехиометрическая смесь компонентов  $Y_2O_3$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $BaCO_3$  и  $CuO$  отжигалась в несколько стадий в кислородной атмосфере с промежуточным механическим измельчением. Тем-

пературы и времена отжига, применявшиеся при синтезе исследованных образцов, приведены в [16].

Рентгеновские данные получены на дифрактометре Rigaku Smartlab SE ( $K_\alpha$ -излучение Cu) в диапазоне углов  $10^\circ \leq 2\theta \leq 120^\circ$  с интервалом  $0.01^\circ$ . Структурные параметры рассчитывали с помощью программного комплекса FullProf в рамках пространственной группы  $Pm\bar{3}m$ .

Микроструктура образцов исследовалась с применением растрового электронного микроскопа с автоэмиссионным катодом QUANTA 650 FEG. Были сделаны серии микрофотографий различных участков на сколе поликристаллов, после чего проведен их количественный анализ. Каждому кристаллиту на поверхности скола (общее количество которых составляло несколько сотен) ставился в соответствие диаметр круга  $D$ , имеющего площадь, равную видимой площади кристаллита. Далее строилась гистограмма распределения величин  $D$ , рассчитывались параметры соответствующих нормальной  $p_n$  и логарифмической нормальной  $p_{ln}$  функций распределения, средний размер кристаллитов  $D_{ev}$  и дисперсия.

Температура перехода в сверхпроводящее состояние определялась из измерений температурных зависимостей низкочастотной комплексной магнитной восприимчивости (частота переменного магнитного поля 980 Гц, амплитуда  $h = 0.11, 1.0$  и  $3.0 \text{ Э}$ ).

Измерения гистерезиса намагниченности во внешнем поле до 6 Тл выполнены на установке PPMS-9 (Quantum Design). Из величины размаха гистерезиса  $\Delta M$  с помощью формулы модели критического состояния Бина для цилиндрического сверхпроводника [22] рассчитывалась плотность внутрикристаллического критического тока  $J_c$ :

$$J_c = 30 \Delta M / D_{eff}. \quad (1)$$

Данная формула справедлива в области магнитных полей, превышающих примерно вдвое поле первого максимума намагниченности, в которой можно полагать  $|M| \ll H \approx B$ . Входящий в формулу (1) эффективный размер кристаллитов  $D_{eff}$ , определяющий размах гистерезиса намагниченности поликристалла, не совпадает со средним размером и определяется выражением

$$D_{eff} = \int D^3 p_{ln}(D) dD \left[ \int D^2 p_{ln}(D) dD \right]^{-1}. \quad (2)$$

При выводе (2) учтено, что вклад в магнитный момент образца от сверхпроводника с диаметром  $D$  пропорционален  $J_c D^3$ , поэтому основной вклад дают наиболее крупные кристаллиты.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Важным критерием выбора метода синтеза допированного ВТСП  $YBaCuO$  являлась возможность достижения высокой степени однородности распределения примесных атомов по объему образца. На рис. 1 (кривая 2), приведен фрагмент дифрактограммы золь-гель-шихты с достаточно высоким содержанием Fe ( $x = 0.08$ ), который демонстрирует отсутствие рефлексов от каких-либо соединений железа, включая оксид. Кроме того, данная дифрактограмма полностью идентична дифрактограмме шихты без железа (рис. 1, кривая 1). Для сравнения на рис. 1 также приведена дифрактограмма стехиометрической смеси коммерческих реактивов  $Y_2O_3$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $BaCO_3$  и  $CuO$ , соответствующей составу с  $x = 0.05$  (кривая 3), на которой хорошо виден пик от оксида железа. Таким образом, в золь-гель-шихте, в отличие от основных компонентов  $Y_2O_3$ ,  $BaCO_3$  и  $CuO$ , не произошла кристаллизация  $Fe_2O_3$ , а железо находится в рентгеноаморфных формах.

В результате проведения высокотемпературных отжигов образцы обеих серий, полученных как с применением золь-гель-процесса, так и твердофазным методом, имели орторомбическую структуру. При этом в содержащих Fe образцах фиксируется небольшое количество примесной фазы  $YBaCuO_2$  (рис. 2). С увеличением  $x$  происходит уширение и

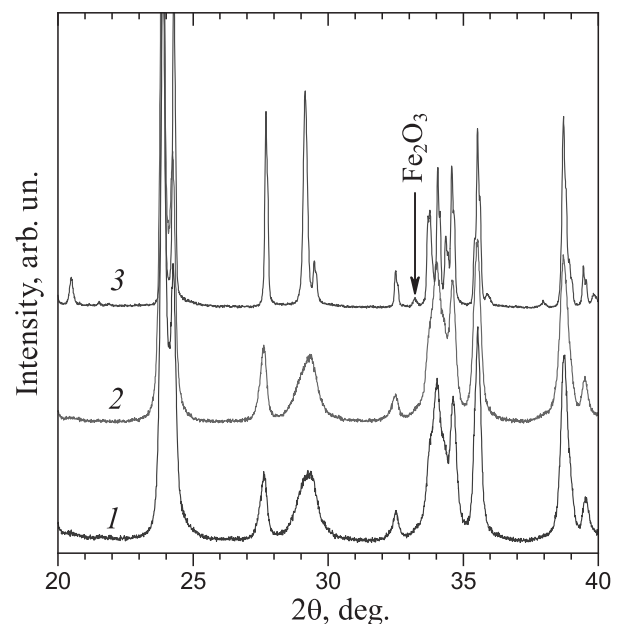


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы золь-гель-шихты для синтеза образцов состава  $YBa_2Cu_3O_y$  (1), состава  $Y_{0.92}Fe_{0.08}Ba_2Cu_3O_y$  (2). Для сравнения приведена дифрактограмма смеси коммерческих реактивов  $Y_2O_3$ ,  $CuO$ ,  $BaCO_3$ ,  $Fe_2O_3$  в соотношении, соответствующем составу  $Y_{0.95}Fe_{0.05}Ba_2Cu_3O_y$  (3). Стрелкой показан пик от  $Fe_2O_3$

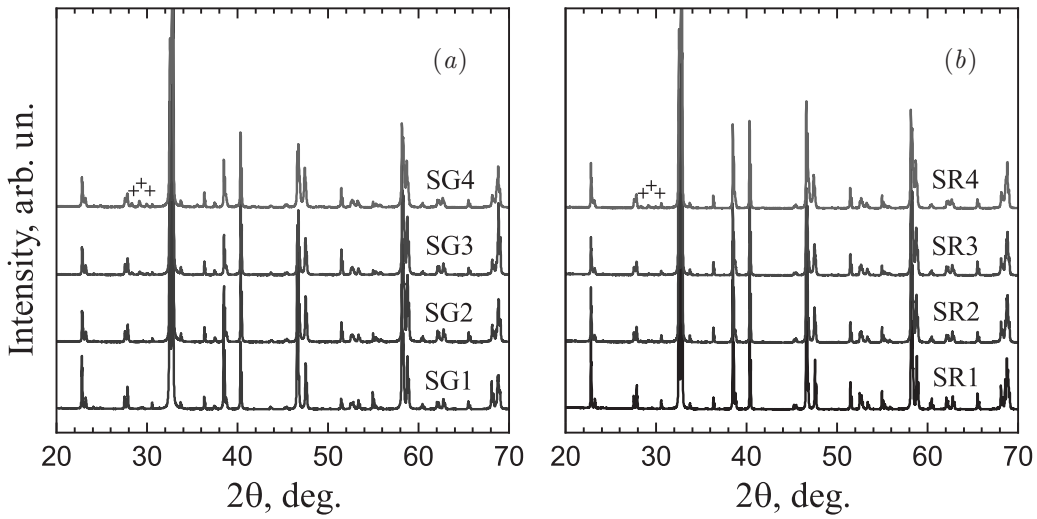


Рис. 2. Рентгенограммы образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$ , синтезированных с применением золь-гель-процесса (а), твердофазным методом (b). Обозначения образцов указаны около кривых. Крестами показаны пики от примесной фазы  $BaCuO_2$

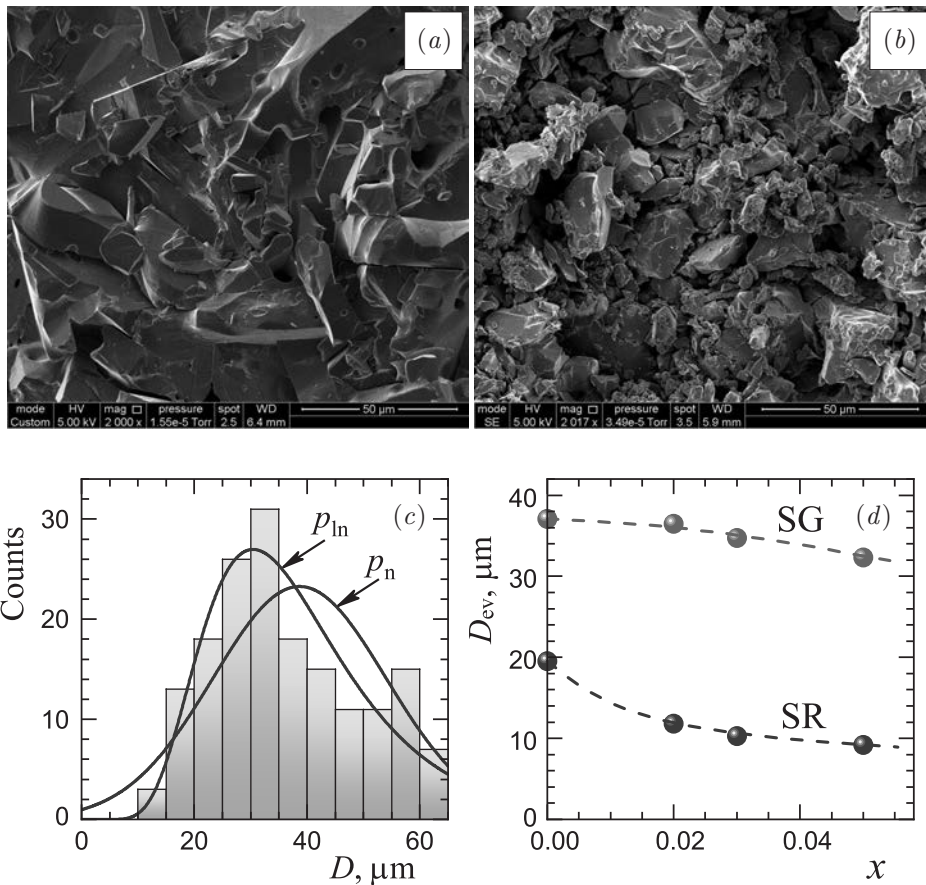
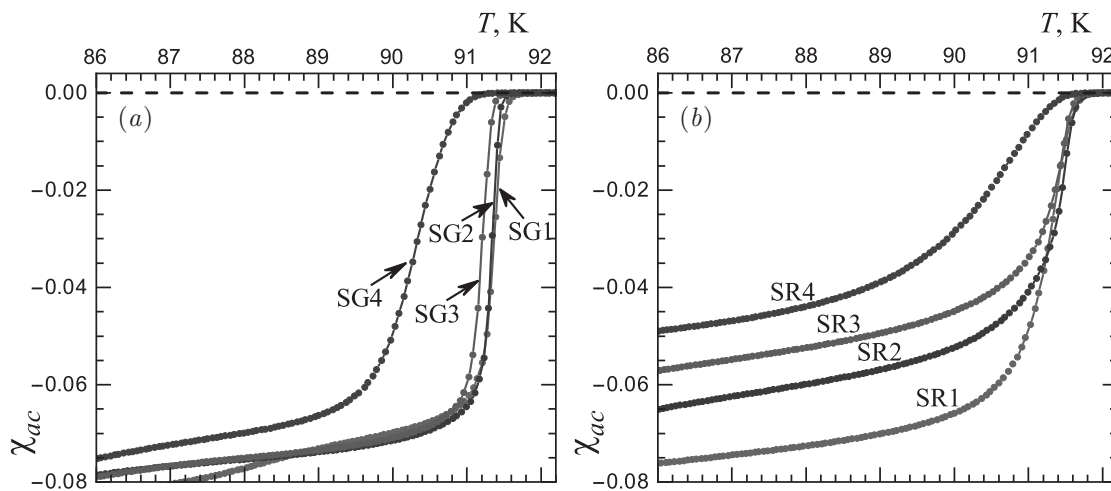


Рис. 3. Микрофотографии образцов ВТСП  $Y_{0.97}Fe_{0.03}Ba_2Cu_3O_y$ , синтезированных с применением золь-гель-процесса (а), твердофазным методом (b) (образцы SG3 и SR3 соответственно). c — Распределение по размерам кристаллитов для образца SG3. Сплошные кривые — соответствующие функции распределения: нормальная ( $p_n$ ) и логнормальная ( $p_{ln}$ ). d — Средний размер кристаллитов в зависимости от содержания железа  $x$ . Обозначения серий образцов указаны около кривых

**Таблица.** Характеристики исследованных образцов  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$ , синтезированных золь–гель-методом (SG) и твердофазным методом (SR) с различным содержанием железа  $x$ : параметры элементарной ячейки  $a, b, c$ ; объем элементарной ячейки  $V_{cell}$ ; степень ромбического искажения  $\sigma = (b-a)/(b+a)$ ; количество примесной фазы  $BaCuO_2$  (Fract.), температура начала перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$

Образец	$x$	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V_{cell}, \text{Å}^3$	$10^3\sigma$	Fract., wt%	$T_c, \text{K}$
SG1	0	3.8220	3.8875	11.688	173.66	8.5	0	91.6
SG2	0.02	3.8226	3.8840	11.681	173.43	8.0	0.06(1)	91.5
SG3	0.03	3.8244	3.8838	11.681	173.50	7.7	0.15(2)	91.4
SG4	0.05	3.8308	3.8820	11.683	173.74	6.6	4.02(5)	90.9
SR1	0	3.8196	3.8850	11.685	173.40	8.5	0	91.7
SR2	0.02	3.8242	3.8836	11.685	173.52	7.7	0.74(6)	91.7
SR3	0.03	3.8259	3.8825	11.684	173.55	7.3	0.82(8)	91.6
SR4	0.05	3.8317	3.8802	11.684	173.71	6.3	1.46(6)	91.3



**Рис. 4.** Температурные зависимости низкочастотной магнитной восприимчивости (амплитуда переменного магнитного поля 3Э) для образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$ , синтезированных с применением золь–гель-процесса (а), твердофазным методом (б). Обозначения образцов указаны около кривых

смещение дифракционных пиков. Параметры кристаллической решетки, а также весовое количество примесной фазы (Fract.), рассчитанные с помощью программы FullProf в рамках пространственной группы  $P4mm$ , приведены в таблице. При изменении содержания железа изменяются величины решеточных параметров образцов обеих серий, характер этих изменений подобен полученным ранее для структурно неупорядоченных образцов без допирования [23]. Наиболее заметными являются увеличение параметра  $a$  и объема элементарной ячейки  $V_{cell}$ , а также уменьшение степени ромбического искажения  $\sigma = (a-b)/(a+b)$ , при этом влияние метода синтеза оказывается слабым. Наличие монотонных изменений решеточных параметров при изменении  $x$  подтверждает, что Fe входит в структуру ВТСП.

Метод синтеза проявился в явном различии микроструктуры образцов. На рис. 3а,б приведены микрофотографии для образцов SG3 и SR3 с содержанием железа  $x = 0.03$ . Уменьшение количества отжига и промежуточных измельчений при использовании золь–гель-шихты позволяет реализовать более крупные и хорошо оформленные кристаллиты, а плотность этих образцов достигает 93% от рентгеновской. При этом дисперсия по размерам кристаллитов оказывается довольно большой, и, как демонстрирует рис. 3с, для образца SG3 диапазон размеров составляет от 10 до 65 мкм. На этом рисунке приведены также соответствующие функции распределения, наилучшее согласие с экспериментом дает логарифмическая нормальная функция. Величины средних размеров кристаллитов  $D_{ev}$  для всех

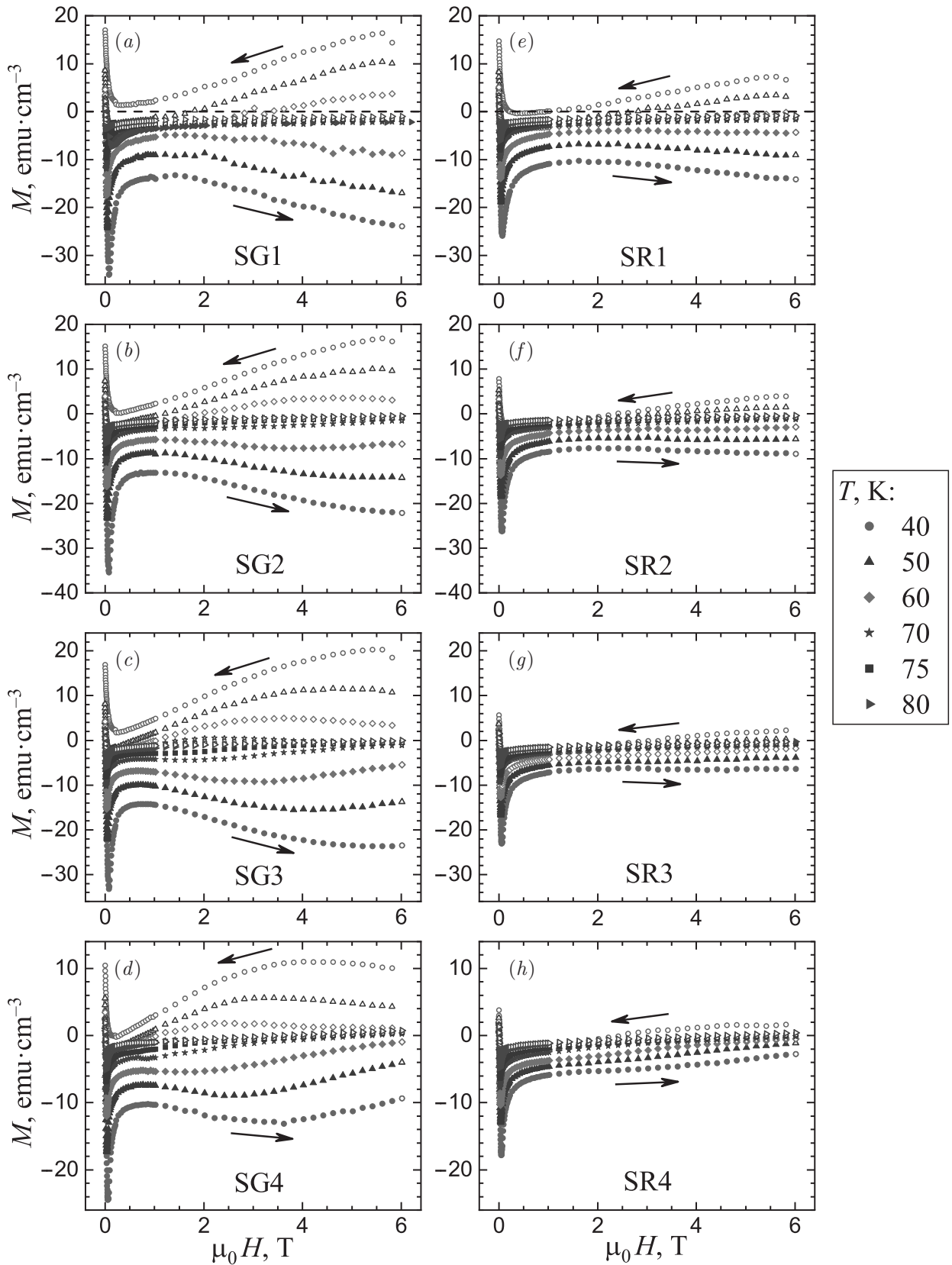
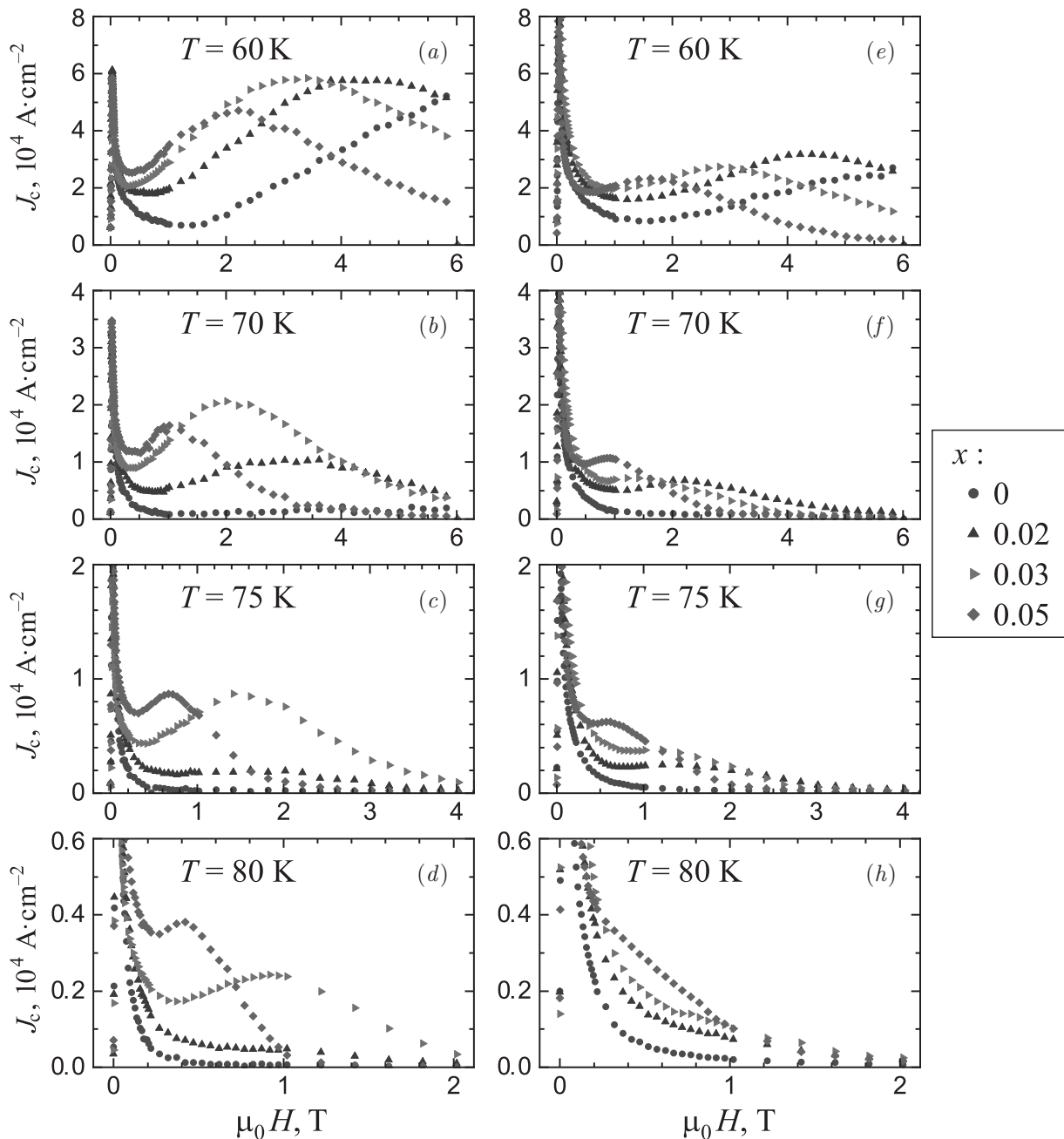


Рис. 5. Полевые зависимости намагниченности образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_7$  с различным содержанием железа  $x$ , синтезированных с применением золь-гель-процесса (a, b, c, d), твердофазным методом (e, f, g, h). Стрелками показано направление изменения внешнего поля



**Рис. 6.** Полевые зависимости плотности критического тока при температурах  $T = 60, 70, 75$  и  $80$  К для образцов ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$  с различным содержанием железа  $x$ , синтезированных с применением золь-гель-процесса (a, b, c, d), твердофазным методом (e, f, g, h)

образцов, рассчитанные на основе параметров функций распределения, представлены на рис. 3d. Видно, что вследствие применения золь-гель-методики увеличение  $D_{ev}$  составляет от двух до трех раз в зависимости от  $x$ .

Величины  $T_c$ , определенные из измерений температурных зависимостей низкочастотной магнитной восприимчивости, оказываются слабо зависящими от метода синтеза (см. рис. 4 и таблицу). Содержа-

ние железа  $x \leq 0.03$  не влияет на величину  $T_c$ , небольшое уменьшение  $T_c$  происходит при  $x = 0.05$ . При  $x = 0.05$  наблюдается также заметное уширение перехода, свидетельствующее о возрастающей структурной неоднородности. Еще одним результатом является уменьшение эффективного экранируемого объема кристаллитов по мере увеличения  $x$  при твердофазном методе синтеза, который демонстрирует рис. 4b. Анализ равновесных кривых на-

магнитности в больших полях для этих образцов, проведенный в [24], показал, что данный результат не связан с уменьшением объема сверхпроводящей фазы, а является проявлением увеличения магнитной анизотропии кристаллитов. Эффекты влияния допирования Fe ВТСП YBaCuO на величину анизотропии наблюдались также в [25].

Различие в методах синтеза оказало существенное влияние на магнитные свойства в сильном постоянном магнитном поле. В золь-гель-образцах значительно увеличился размах гистерезиса намагниченности  $\Delta M(H)$ , более ярко проявились особенности, связанные с немонотонным поведением полевых зависимостей (см. рис. 5).

С помощью формулы (1) из данных измерения гистерезиса намагниченности рассчитаны полевые зависимости плотности внутрикристаллического критического тока  $J_c$ . Результаты в области температур вблизи температуры кипения жидкого азота, наиболее важной для практических применений, приведены на рис. 6.

Видно, что создаваемые примесным железом центры пиннинга значительно увеличивают  $J_c$  по сравнению с не содержащими железа образцами при обоих методах синтеза. Различие в методе синтеза и, соответственно, в степени пространственного упорядочения атомов замещения, проявилось в больших значениях  $J_c$ , а также в более ярко выраженном втором максимуме на кривых  $J_c(H)$  («пик-эффект») в золь-гель-образцах. Следует отметить, что пик-эффект реализуется также при замещениях в медной и бариевой подрешетках YBaCuO [10, 11, 13], однако в рассматриваемой системе увеличение  $J_c$  при той же степени допирования железом оказывается примерно в пять раз больше. В соответствии с существующими представлениями пик-эффект является следствием взаимодействия вихревой решетки с системой центров пиннинга. Магнитное поле  $H_p$ , в котором  $J_c$  достигает максимума, отвечает фазовому переходу в вихревой решетке [26]. При этом увеличение эффективности взаимодействия вихрей с точечными дефектами как вследствие увеличения их концентрации, так и с ростом температуры, должно приводить к сдвигу величины  $H_p$  в область меньших полей [27]. Именно такой эффект наблюдается в исследованных образцах с различным содержанием Fe (рис. 6).

Важно отметить, что даже при слабом допировании (в несколько процентов) элементарные ячейки с катионным замещением нельзя рассматривать как изолированные с точки зрения формирования сверхпроводящего состояния и эффектов пиннин-

га. Действительно, при  $x = 0.03$  среднее расстояние между такими ячейками составляет величину  $(V_{cell}/x)^{1/3} \approx 1.8$  нм, которая оказывается порядка длины когерентности. Таким образом, формируется наноразмерная система магнитных дефектов, взаимодействие вихрей с которой имеет коллективный характер и оказывается чувствительным к степени упорядочения катионов замещения.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен синтез двух серий ВТСП  $Y_{1-x}Fe_xBa_2Cu_3O_y$  ( $0 \leq x \leq 0.05$ ), различающихся методом получения исходной шихты и последующих высокотемпературных отжигов. В первой серии применялась золь-гель-технология на начальном этапе, во второй использовалась смесь коммерческих реактивов. Применение золь-гель-процесса позволило уменьшить количество, температуры и время отжигов и реализовать образцы с существенно лучшими структурными и физическими характеристиками. Проведен комплекс рентгеновских, электронно-микроскопических и магнитных исследований, определено влияние метода синтеза на свойства образцов. Показано, что золь-гель-процесс позволил получить высокоплотные крупнокристаллические образцы (плотность достигает 93% от рентгеновской) с более однородным распределением атомов замещения. В результате уменьшился температурный интервал перехода в сверхпроводящее состояние, увеличился размах магнитного гистерезиса намагниченности, более ярко проявились эффекты немонотонного поведения намагниченности.

Пространственно-однородное распределение центров пиннинга, создаваемых атомами замещения в золь-гель-образцах, проявляется в увеличении плотности критического тока и в более ярко выраженном характере второго максимума в поле  $H_p$  на полевых зависимостях внутрикристаллического критического тока. Зависимость  $H_p$  от степени допирования позволяет проводить выбор оптимального состава ВТСП-материалов на основе YBaCuO с целью достижения максимального критического тока при заданных физических условиях (температура и магнитное поле) практического применения.

**Благодарности.** Измерения магнитных свойств при низких температурах и в сильных магнитных полях выполнены на оборудовании ЦКП ФМИ ИОНХ РАН. Микрофотографии получены с помощью сканирующего электронного микроскопа в ЦКП ФМИ ИФХЭ РАН.



**Финансирование.** Работа выполнена за счет субсидии Министерства науки и высшего образования России, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме «Наноструктурированные системы нового поколения с уникальными функциональными свойствами» (№ 122040500071-0).

## ЛИТЕРАТУРА

- G. V. M. Kiruthika, K. V. Govindan Kutty, and U. V. Varadaraju, *Solid State Ionics* **110**, 335 (1998).
- A. V. Shlyakhtina, N. V. Lyskov, A. N. Shchegolikhin, S. A. Chernyak, A. V. Knotko, I. V. Kolbanev, and L. G. Shcherbakova, *Ceram. Int.* **46**, 17383 (2020).
- Е. Д. Политова, Г. М. Калева, А. В. Мосунов, С. Ю. Стефанович, Е. В. Ключкина, Е. А. Беспалова, А. В. Лопатин, Н. М. Метальников, М. Э. Сапрыкин, А. Б. Логинов, И. В. Оразов, Б. А. Логинов, *Неорган. матер.* **58**, 1377 (2022).
- J. Ma, K. Chen, C. Li, X. Zhang, and L. An, *Ceram. Int.* **47**, 24348 (2021).
- J. Zhang, S. Liu, Z. Tian, Y. Zhang, and Z. Shi, *Materials* **16**, 2214 (2023).
- J. Mrázek, S. Kamrádková, J. Buršík, R. Skála, I. Bartoň, P. Varák, Y. Baravets, and O. Podrazký, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **107**, 320 (2023).
- B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, *Nature* **518**, 179 (2015).
- Л. Г. Мамсурова, К. С. Пигальский, Н. Г. Трусевич, А. А. Вишнёв, М. А. Рогова, С. Ю. Гаврилкин, Ф. Ю. Цвечков, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 752 (2015).
- J. Shimoyama, Y. Tazaki, Y. Ishii, T. Nakashima, S. Horii, and K. Kishio, *J. of Phys.: Conf. Series* **43**, 235 (2006).
- Y. Ishii, J. Shimoyama, Y. Tazaki, T. Nakashima, S. Horii, and K. Kishio, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 202514 (2006).
- K. Rogacki, B. Dabrowski, and O. Chmaissem, *Phys. Rev. B* **73**, 224518 (2006).
- A. Los, B. Dabrowski, and K. Rogacki, *Cur. Appl. Phys.* **27**, 1 (2021).
- R. F. Lopes, V. N. Vieira, F. T. Dias, P. Pureur, J. Schaf, M. L. Hneda, and J. J. Roa, *IEEE Trans.: Appl. Supercond.* **26**, 8002004 (2016).
- F. Minghu, C. Meng, J. Zhengkuan, and Z. Qirui, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 3892 (1994).
- D. M. Gokhfeld, D. A. Balaev, I. S. Yakimov, M. I. Petrov, and S. V. Semenov, *Ceram. Inter.* **43**, 9985 (2017).
- K. S. Pigalskiy, A. A. Vishnev, N. N. Efimov, A. V. Shabatin, and L. I. Trakhtenberg, *Curr. Appl. Phys.* **41**, 116 (2022).
- M. Kakihana, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **6**, 7 (1996).
- R. S. Liu, W. N. Wang, C. T. Chang, and P. T. Wu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **28**, L2155 (1989).
- E. Blinov, V. G. Fleisher, H. Huhtinen, R. Laiho, E. Lähderanta, P. Paturi, Yu. P. Stepanov, and L. Vlasenko, *Supercond. Sci. Technol.* **10**, 818 (1997).
- J. Raittila, H. Huhtinen, P. Paturi, and Yu. P. Stepanov, *Physica C* **371**, 90 (2002).
- Л. Г. Мамсурова, Н. Г. Трусевич, А. А. Вишнёв, К. С. Пигальский, Л. И. Трахтенберг, *Хим. физика* **39**, 66 (2020).
- J. R. Clem and V. G. Kogan, *Jap. J. Appl. Phys.* **26**, 1161 (1987).
- А. М. Балагуров, Л. Г. Мамсурова, И. А. Бобринков, То Тхань Лоан, В. Ю. Помякушин, К. С. Пигальский, Н. Г. Трусевич, А. А. Вишнев, *ЖЭТФ* **141**, 1144 (2012).
- K. S. Pigalskiy, N. N. Efimov, P. N. Vasilyev, A. A. Vishnev, and L. I. Trakhtenberg, *Physica C* **612**, 1354318 (2023).
- T. Ugawa, S. Horii, T. Maeda, M. Haruta, and J. Shimoyama, *Physica C* **494**, 41 (2013).
- Y. Paltiel, E. Zeldov, Y. N. Myasoedov, H. Shtrikman, S. Brattacharya, M. J. Higgins, Z. L. Xiao, E. Y. Andrei, P. L. Gammel, and D. J. Bishop, *Nature* **403**, 398 (2000).
- G. P. Mikitik and E. H. Brandt, *Phys. Rev. B* **64**, 184514 (2001).

# FABRICATION AND STUDY OF THE $p - \text{Si}/\alpha - \text{Si}/\text{Ag}$ MEMRISTOR CROSSBAR ARRAY

A. Samsonova <sup>a\*</sup>, S. Yegiyanyan <sup>a</sup>, O. Klimenko <sup>a,b</sup>, V. N. Antonov <sup>a</sup>, G. Paradezhenko <sup>a</sup>,  
D. Prodan <sup>a</sup>, A. Pervishko <sup>a</sup>, D. Yudin <sup>a</sup>, N. Brilliantov <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Skolkovo Institute of Science and Technology  
121205, Moscow, Russia

<sup>b</sup> P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences  
119991, Moscow, Russia

Received February 16, 2024,  
revised version March 12, 2024,  
Accepted for publication March 13, 2024

We study the formation of the conductive channels in  $\alpha$ -Si memristors and demonstrate their operation in the crossbar array. The latter can be utilised as the basic component of the neuromorphic chip tailored for edge computing. The conductive channels in  $\alpha$ -Si are formed by the migration of Ag along with Cu ions. Such a channel has switching current-voltage characteristics at high bias,  $V_{bias} > 2\text{V}$ , and highly non-linear that at low bias,  $V_{bias} < 0.5\text{V}$ . Memristor can be re-programmed to different resistance states with short voltage pulses of amplitude above 2 V. We demonstrate the programming of the memristor crossbar array and its operation in vector-by-matrix multiplication with an 87% accuracy.

DOI: 10.31857/S004445102408011X

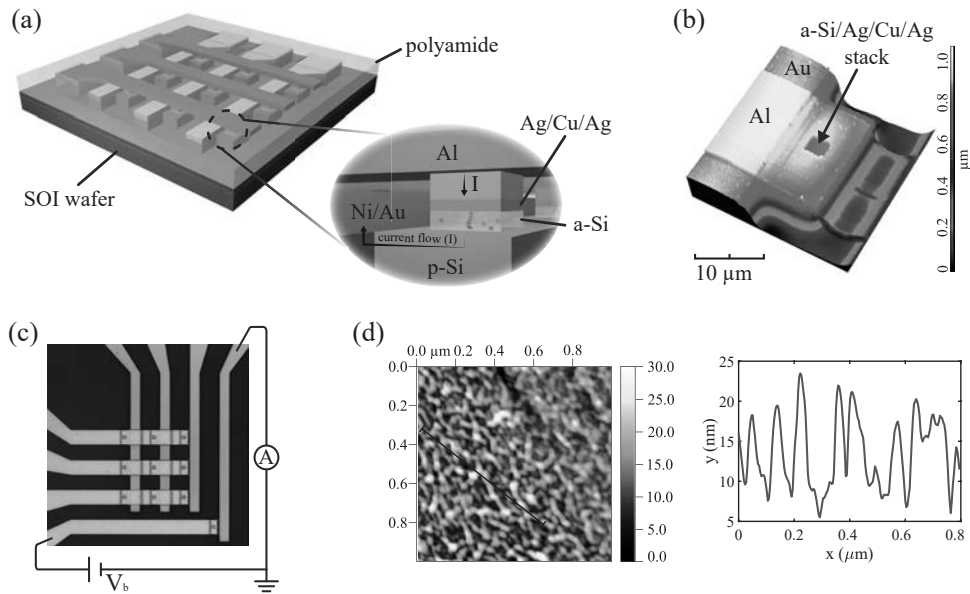
## 1. INTRODUCTION

The concept of neuromorphic computing has evolved over the decades into an interdisciplinary field at the boundary between neuroscience and advanced computing [1]. Aiming to overcome the limitations of the von Neumann architecture, neuromorphic systems tend to exploit in-memory and parallel computing principles, which are crucially important for such intensively developing areas as edge computing, the Internet of Things, and machine learning [2]. Memristors, multilevel two-terminal storage devices, are considered one of the candidates for the hardware implementation of neuromorphic systems that enable parallel computing with low power consumption [3]. The ideal memristor should have re-programmable resistance states, strong non-linear current-voltage characteristics at low bias voltage, and a long retention time.

Typically, the core part of a memristor consists of two metal electrodes and an insulating layer in between,

which serves as a switching and non-linear medium. A conductive channel can be formed by metal ions drifting under an applied electric field in the insulating layer [4]. When the electric field between the metal electrodes exceeds a threshold value, the metal ions diffuse into the insulating layer, where they form conductive channels. The conductive channels are prone to variations under external signals. Ideally, the variations should be done in a fully controllable way [5]. There is a wide range of insulating materials and metals used in the memristors, such as oxides, nitrides, selenides, perovskites, polymeric materials, amorphous silicon ( $\alpha$ -Si), Ag, Cu, Ti, etc. [1] However, a common problem, called the «tunability–stability dilemma» between the controllable tuning of resistance and its long-term stability, remains unsolved [6]. It arises because of the poor control of highly mobile metal ions. For instance, Ag conductive channels in  $\alpha$ -Si demonstrate a good switching capability due to the high mobility of Ag ions. However, its functionality is limited by the large stochasticity of the ion movement, which results in the low stability of conductive channels. Recently, Yeon et al. has shown that Cu can promote and stabilise Ag channels in  $\alpha$ -Si [7]. Cu ions make stable compounds with Si (silicides) and have good compati-

\* E-mail: alena.samsonova@skoltech.ru



**Fig. 1.** Material composition of the  $\alpha$ -Si memristor with Ag/Cu conductive channels. *a* — Layer-by-layer structure of the device. The Ni/Au electrodes contact the *p*-Si of the SOI wafer, whereas the Al electrodes contact the Ag/Cu layer. The conductive channel is formed in  $\alpha$ -Si by the diffusion of Ag and Cu ions. Polyamide insulates the bottom and top electrodes. *b* — AFM image of the node of a memristor crossbar array. The conductive channel is formed in the polyamide window with  $\alpha$ -Si/Ag/Cu/Ag stack. *c* — Optical microscope image of a  $3 \times 3$  memristor crossbar array and one standalone memristor. A schematic of a *dc* measurement circuit is included, illustrating the application of a bias voltage  $V_b$  across Au (bitline) and Al (wordline) electrodes. *d* — AFM image of a 1- $\mu$ m-thick *p*-Si prior to the deposition of  $\alpha$ -Si/Ag/Cu/Ag stack

bility with Ag. The authors have significantly improved the stability of resistance states and the repeatability of switching in  $\alpha$ -Si. Further improvement of the channel stability has been achieved by introducing a barrier layer of intrinsic silicon oxide ( $i$ -SiO<sub>x</sub>) in between  $\alpha$ -Si and *p*-Si ( $\rho=0.001-0.005 \Omega\cdot\text{cm}$ ) [8]. This oxide exhibits Ag diffusivity comparable to that in  $\alpha$ -Si and on its own demonstrates reliable multilevel resistive switching with high endurance [9–11]. At the same time, diffusivity of Cu in  $i$ -SiO<sub>x</sub> is lower [12]. Thus, a thin layer of  $i$ -SiO<sub>x</sub> may limit the motion of ions when stacked with  $\alpha$ -Si such that resistive switching occurs predominantly at the  $\alpha$ -Si/ $i$ -SiO<sub>x</sub> interface. However, despite the broad research done with  $\alpha$ -Si memristors, it is still not entirely clear what factors might influence filament stability of Ag/Cu filaments in  $\alpha$ -Si.

For the applications, the memristors are assembled into a crossbar array, see Fig. 1 *a*. Such an array can efficiently perform matrix operations, like vector-by-matrix multiplication and solving linear equations. It reduces the complexity of big data analysis problems from  $\mathcal{O}(N^{3.5}) - \mathcal{O}(N^4)$  to pseudo- $\mathcal{O}(N)$  [13]. For such functionality, large-scale memristor crossbar arrays must fully meet the following requirements: (i)

uniform digital and analogue switching with  $<1\%$  spatial and temporal variation; (ii) stable analogue switching with linear and symmetrical up/down conductance update; and (iii) long retention time of each resistance state.

In this work, we study memristors made of Ag/Cu conductive filaments in  $\alpha$ -Si. When placed in contact with *p*-Si, the memristor behaves as a one-diode-one-memristor (1D1R) with an intrinsic current non-linearity [14]. Here, the role of the diode is played by the Schottky barrier at the interface between *p*-Si and  $\alpha$ -Si. We explore both individual memristors and crossbar arrays of memristors. A stable channel is formed when the thickness of the  $\alpha$ -Si layer is 5 nm–10 nm. The bias voltage for the formation of the conductive channel is above 5 V. The resistance of the state can be altered with the programming voltage pulses of amplitude above 2 V and duration longer than 0.1 s.

For assessment of the technology, we demonstrate a product of a vector and a square  $3 \times 3$  matrix. The analog result agrees with the expected values with 87% accuracy. The accuracy is limited by the presence of the sneak path currents in a crossbar array and arbitrary fluctuations of resistance.

## 2. EXPERIMENTS AND DISCUSSION

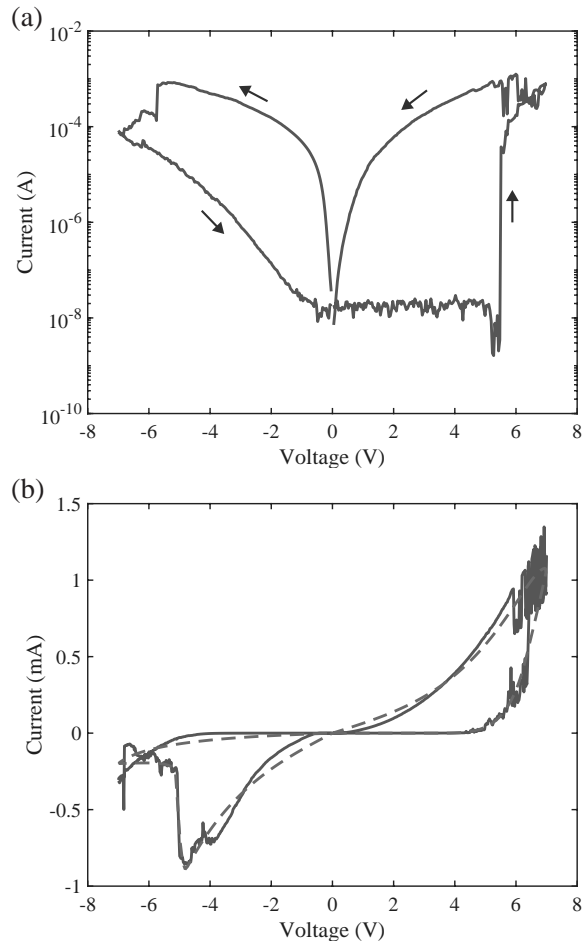
### 2.1. Fabrication of the memristors

The crossbar with the memristor is shown in Fig. 1 *a*. We start with the SOI wafer having a 5- $\mu\text{m}$ -thick  $p$ -Si as the device layer ( $\rho=0.01\text{--}0.02\ \Omega\cdot\text{cm}$ ) isolated from a bulk Si with a 2- $\mu\text{m}$ -thick  $\text{SiO}_2$  layer. The  $p$ -Si layer is thinned down to 0.8–1  $\mu\text{m}$  with  $\text{SF}_6$  plasma etching followed by fabrication of the 10- $\mu\text{m}$ -wide Ni(10 nm)/Au(90 nm) wordlines. The overall contact resistance between  $p$ -Si and Au/Ni is below 3  $k\Omega$ . The  $p$ -Si is then removed to isolate the wordlines from each other, and only  $10\times 10\ \mu\text{m}^2$   $p$ -Si stands for memristor stack are retained. The surface of the stands has a roughness of  $\sim 5$  nm, see Fig. 1 *d*. The stacks of  $\alpha$ -Si(5–10 nm)/Ag(3 nm)/Cu(3 nm)/Ag(15 nm) are deposited on the stands during the next fabrication step. The top Al (120 nm) electrodes, or the wordlines, are fabricated over the stack perpendicular to the bitlines. The Au/Ni and Al lines are isolated from each other with the 500-nm-thick polyamide. The polyamide also covers the  $p$ -Si stands, and only windows of  $1.25\times 1.25\ \mu\text{m}^2$  to  $2\times 2\ \mu\text{m}^2$  are open in the polyamide for  $\alpha$ -Si/Ag/Cu/Ag stack to contact  $p$ -Si. We do not observe, however, any dependence of probability and density of the Ag/Cu filaments in  $\alpha$ -Si on the window size. We also explore the effect of varying thicknesses of  $\alpha$ -Si and Cu layers while keeping the Ag layer intact, as the relative thicknesses of Ag and Cu may affect the endurance of the memristor [7].

### 2.2. Operation of the memristors

The newly fabricated memristors have a high resistance in the  $\text{G}\Omega$  range. The noticeable conductance appears when a bias voltage, typically larger than 5 V, is applied, see Fig. 2 *a*. The transition is step-like; the current increases by almost 6 orders of magnitude, from nA to mA. At higher bias, the curve has several up/down current steps. The negative bias below 4 V resets the device to a high resistance state.

The memristor circuit can be modeled as a chain of elements in sequence: the metallic Ni/Au electrode with an ohmic contact to heavily doped  $p$ -Si, the insulating  $\alpha$ -Si, and the metallic Ag/Cu/Ag/Al top contact. The phenomenological model of the device elaborated in [15] nicely fits an experimental  $I$ - $V$  curve; see the dashed curve in Fig. 2 *b*. The model was developed for the metal-TiO<sub>2</sub>-metal structure. It takes into account a time-dependent threshold bias voltage, non-



**Fig. 2.** Current–voltage characteristics of the  $\alpha$ -Si memristor. *a* — The electroforming  $I$ - $V$  curve of a fresh memristor. Conductive Ag/Cu channels are formed in  $\alpha$ -Si when the bias voltage exceeds 5 V. The state relaxes back to high resistance when the negative voltage is applied. *b* — Approximation of the electroforming curve with the generalised model, shown with a dashed curve [15]. The fitting parameters are given in Table 1

linear ion diffusion, and electron tunneling. A set of the fitting parameters is given in Table 1. The threshold switching voltage in the model,  $V_p$ , of 5.0 V is close to what was observed in the experiment. The different resistance states developed by programming pulses are likely a result of the ion motion in the Ag/Cu filament formed in  $\alpha$ -Si. With an increasing number of programming pulses, the arrangement of the ions in the filament is stabilised, so it becomes harder to alter the resistance states [16]. In the model, this corresponds to the saturation of the state variable at the boundary [15].

**Table 1.** Calculated fitting parameters according to the phenomenological model presented in [15].  $\alpha_p, \alpha_n, w_p,$  and  $w_n$  determine when the motion of a state variable is no longer linear and to which degree it is dampened;  $A_p$  and  $A_n$  show the speed of ion motion;  $V_p$  and  $V_n$  represent threshold voltages for positive and negative biases, respectively;  $a_1$  and  $a_2$  are related to the thickness of the dielectric layer;  $b$  determines the non-linearity of  $I$ - $V$  characteristics;  $w_0$  is the initial value of a state variable;  $f(\mathbf{p}^*)$  is the final residue value of the fitting parameters  $\mathbf{p}^*$

$\alpha_p$	$\alpha_n$	$w_p$	$w_n$	$A_p$	$A_n$	$V_p$
1.10	13.42	0.017	0.57	0.33	3.11	5.06

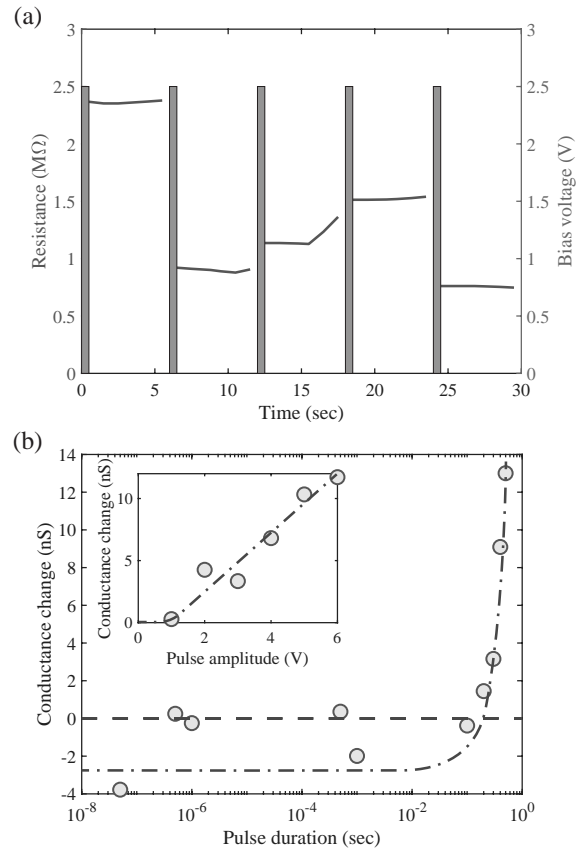
$V_n$	$a_1$	$a_2$	$b$	$w_0$	$f(\mathbf{p}^*)$
4.60	0.19	0.31	0.39	0.04	0.77

There are a limited number of distinct states that memristors may take on in response to voltage pulses, Fig. 3 a. The switching between the resistance states is rather stochastic, but negative pulses predominantly decrease conductivity and may even reset the memristor to its original high resistance state. To alter the resistance state, we apply square voltage pulses from 1 V to 7 V of various durations, from 50 ns to several seconds; Fig. 3 b. There is a little effect if pulses shorter than 100 ms are applied. It may be explained by the slow dynamics of the Ag/Cu ions in  $\alpha$ -Si. A somewhat similar threshold effect is observed with the amplitude of the pulse. A noticeable effect starts with pulses larger than 1 V; see Fig. 3 b, inset.

Despite the stochastic nature of resistive switching, the states are stable over time, Fig. 4. It takes some time for the resistance to relax to a stable value after the programming pulses. The relaxation time is varied among the memristors in a wide range of  $\tau \approx 100$  ms–1000 s. There is a correlation between the relaxation time and the duration of the voltage pulse; a shorter pulse results in faster relaxation. However, we did not find any consistency in the relaxation time across different memristors.

The thickness of  $\alpha$ -Si is one of the limiting parameters of the memristor. We observed stable multi-state switching in  $\alpha$ -Si with thickness ranging from 6 to 9 nm. It is consistent with the results of other experimental groups [7].

We have also investigated the transport properties and switching behaviour of the Ag/Cu filament in  $\alpha$ -Si

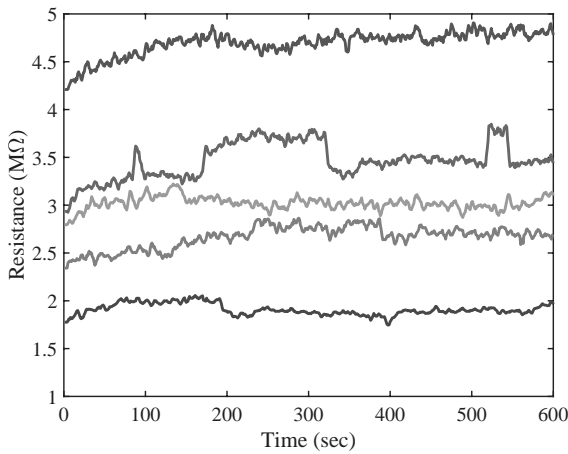


**Fig. 3.** Response of pre-formed  $\alpha$ -Si memristors to short voltage pulses. *a* — Change of the resistance with a sequence of programming pulses 5 V/0.5 s (red bars). *b* — The threshold nature of the programming with the pulse duration or pulse amplitude (inset). The conductance changes when pulses longer than 0.1 s and larger than 1 V are applied

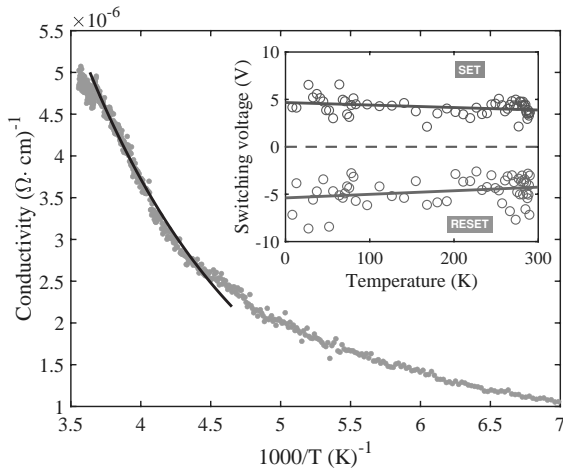
at low temperatures down to 150K. The conductivity at temperatures above 220 K can be modeled by the activation of the electrons in the extended states of  $\alpha$ -Si by  $\sigma = \sigma_0 \exp\{-E_a/kT\}$ , where activation energy  $E_a = 0.1$  eV, Fig. 5 [17]. We also observed that the switching voltage decreases with rise in temperature, suggesting that Joule heating may play a role in both the formation and rupture of the channel, Fig. 5, inset.

### 2.3. Analysis of 3×3 memristor crossbar array

At low bias, the  $I$ - $V$  curves of memristors are non-linear. The non-linearity can be characterised by the ratio of current at the bias voltage  $V$  and that at  $V/2$  [14]. For our memristors, the ratio reaches 12. The non-linearity limits the size of the usable memristor crossbar array because of the parasitic sneak-path cur-



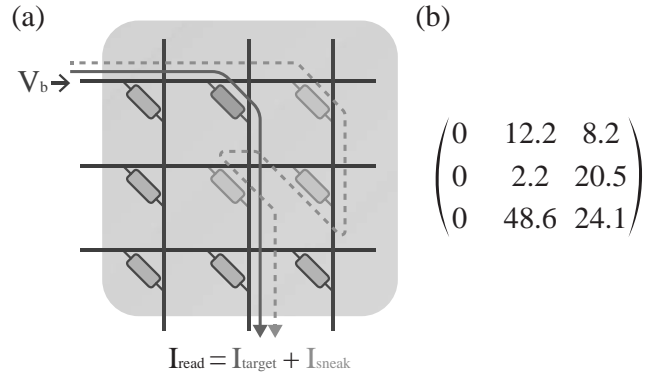
**Fig. 4.** Variation of resistance of a single memristor demonstrating the relaxation and retention of the memristor after the programming pulse



**Fig. 5.** Temperature dependence of the memristor conductivity in a temperature range from 285 K to 150 K. The solid black line is a fitting curve assuming the activation energy  $E_a = 0.1$  eV. Inset: distribution of set and reset voltages in a wide temperature range

rents, which alter the weight of the matrix nodes when the input load to the matrix lines changes; see Fig. 6 *a*. The parameters of our memristor allow us to design a crossbar array of  $10 \times 10$ . For the demonstration, we explore a smaller crossbar array of  $3 \times 3$ . Here, the 3-memristor-long and 5-memristor-long sneak-path currents should be taken into account [18].

We programme memristors with 5 V pulses and probe the states with 0.5 V pulses for 500 ms. In what follows, we use conductance instead of resistance for the state of the nodes. After the initial programming, the memristors have conductances ranging from 4.4 nS



**Fig. 6.** Utilisation of a  $3 \times 3$  crossbar array of memristors for vector-by-matrix multiplication. *a* — Sneak-path current in the memristor crossbar array. The current flows not only through the target cell ( $I_{target}$ ), but also through the neighbouring cells ( $I_{sneak}$ ). *b* — Matrix with the node weights. The weights are conductances normalised to 2 nS for convenience

**Table 2.** The vector-by-matrix multiplication

vector	(1 1 1)	(1 1 0)
prediction, nA	(0 62.9 34.2)	(0 14.3 10.2)
measurement, nA	(0 49.5 24.0)	(0 13.0 8.6)
rel.dev., %	(0 21.3 29.8)	(0 9.1 15.7)

vector	(1 0 1)	(0 1 1)
prediction, nA	(0 60.7 32.2)	(0.2 50.7 26.1)
measurement, nA	(0 49.5 32.3)	(0.1 49.5 23.8)
rel.dev., %	(0 18.5 0.3)	(0 2.4 8.8)

to 97 nS. We normalised them to 2 nS for convenience and presented them in the form of a matrix of weights in Fig. 6 *b*. One should mention that these values contain the effect of sneak-path currents when the bias is applied to the wordline of the corresponding node. We would expect that the weight would change if several input signals are applied to the crossbar array simultaneously. The memristors at the left-most bitline are in the high-resistance state; thus, their conductance is taken as 0. The current flowing across them is below the noise level of our measurement system.

We exploit the crossbar arrays by applying voltage signal to only one or to few wordlines. In the former instance, we have the following input vectors (1 0 0), (0 1 0) and (0 0 1), where «1» corresponds to 0.5 V and «0» to 0.0 V. This method allows us to get the weights in the matrix, Fig. 6 *b*. An expected output current for the vector-by-matrix multiplication with this

weight matrix at the  $j$ -th bitline is  $I_j = \sum_{i=1}^3 V_i G_{ij}$ , where  $V_i$  is an input voltage to the  $i$ -th wordline and  $G_{ij}$  is the conductance of the node at the  $i$ -th wordline and  $j$ -th bitline. We compare these results with the that when the other vectors are at the input: (1 1 1), (1 1 0), (1 0 1), and (0 1 1). The readings and relative deviation ( $\text{rel.dev} = (|I_{\text{pred}} - I_{\text{meas}}|)/I_{\text{pred}}$ ) are shown in Table 2. The difference between the values can be as high as 30%. It is due to the effect of sneak-path currents combined with the non-linear conductance of the memristors,  $G_{ij}(V) \neq \text{const}$ . We should note that the sneak path currents are eliminated when we send the vector (1 1 1) [18]. Another possible reason of the deviation is the fluctuation of  $G_{ij}$ 's with time.

### 3. CONCLUSION

We fabricate and explore individual memristors and crossbar arrays of memristors. The memristors have switching non-linear  $I$ - $V$  characteristics when the programming voltage greater than 2 V is applied. It is a consequence of the Ag/Cu filamentation in the thin  $\alpha$ -Si layer, which brings the resistance of the memristor to the  $M\Omega$  range. We can alter the resistance state with voltage pulses above 2 V and durations longer than 100 ms. We have combined memristors into a  $3 \times 3$  crossbar array and performed vector-by-matrix multiplication. The sneak-path currents and arbitrary fluctuations of the resistance state result in an 87% accuracy of the operation.

**Funding.** We acknowledge support of Skoltech Next Generation Program, grant number 1-NGP-1064.

### REFERENCES

1. J. J. Yang, D. B. Strukov, and D. R. Stewart, *Memristive Devices for Computing*, Nature Nanotechnology **8**, 13 (2012).
2. O. Krestinskaya, A. P. James, and L. O. Chua, *Neuromemristive Circuits for Edge Computing: A Review*, IEEE Trans. on Neural Networks and Learning Systems **31**, 4 (2020).
3. D. Marković, A. Mizrahi, D. Querlioz, and J. Grollier, *Physics for Neuromorphic Computing*, Nature Rev. Phys. **2**, 499 (2020).
4. R. Yang, P. Gao, S. Gaba, et al., *Observation of Conducting Filament Growth in Nanoscale Resistive Memories*, Nature Commun. **3**, 732 (2012).
5. A. V. Emelyanov, K. E. Nikiruy, V. A. Demin, et al., *Yttria-Stabilized Zirconia Cross-Point Memristive Devices for Neuromorphic Applications*, Microelectronic Engineering **215**, 110988 (2019).
6. J. Woo and S. Yu, *Resistive Memory-Based Analog Synapse: The Pursuit for Linear and Symmetric Weight Update*, IEEE Nanotechnology Magazine **12**, 36 (2018).
7. H. Yeon, P. Lin, C. Choi, et al., *Alloying Conducting Channels for Reliable Neuromorphic Computing*, Nature Nanotechnology **15**, 574 (2020).
8. Д. В. Ичёткин, М. Е. Ширяев, Д. В. Новиков, и др., *Многоуровневые мемристорные структуры на основе  $\alpha$ -Si с повышенной устойчивостью резистивного переключения и малыми токами потребления*, Письма в ЖТФ **49**, 39 (2023).
9. J. D. McBrayer, R. M. Swanson, T. W. Sigmon, *Diffusion of Metals in Silicon Dioxide*, J. Electrochem. Soc. **133**, 1242 (1986).
10. F. Rollert, N. A. Stolwijk, H. Mehrer, *Solubility, Diffusion and Thermodynamic Properties of Silver in Silicon*, J. Phys. D: Appl. Phys. **20**, 1148 (1987).
11. Z. Ma, J. Ge, W. Chen, et al., *Reliable Memristor Based on Ultrathin Native Silicon Oxide*, ACS Applied Materials and Interfaces **14**, 21207 (2022).
12. A. A. Istratov, E. R. Weber, *Physics of Copper in Silicon*, J. Electrochem. Soc. **149**, G21 (2002).
13. A. Ren, S. Liu, R. Cai, et al., *Algorithm-Hardware Cooptimization of the Memristor-Based Framework for Solving Socp and Homogeneous Qcqp Problems*, 2017 22nd Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASPDAC), IEEE (2017).
14. Q. Xia and J. J. Yang, *Memristive Crossbar Arrays for Brain-Inspired Computing*, Nature Materials **18**, 309 (2019).
15. C. Yakopcic, T. M. Taha, G. Subramanyam, R. E. Pino, and S. Rogers, *A Memristor Device Model*, IEEE Electron Device Lett. **32**, 1436 (2011).
16. R. Konlechner, A. Allagui, V. N. Antonov, and D. Yudin, *A Superstatistics Approach to the Modelling of Memristor Current-voltage Responses*, Phys. A: Statistical Mechanics and its Applications **614**, 128555 (2023).
17. P. G. Le Comber and W. E. Spear, *Electronic Transport in Amorphous Silicon Films*, Phys. Rev. Lett. **25**, 509 (1970).
18. R. Joshi, and J. M. Acken, *Sneak Path Characterization in Memristor Crossbar Circuits*, Int. J. Electronics **108**, 1255 (2020).

# UNTANGLING THE VALLEY STRUCTURE OF STATES FOR INTRAVALLEY EXCHANGE ANISOTROPY IN LEAD CHALCOGENIDES QUANTUM DOTS

*I. D. Avdeev*<sup>\*</sup>, *M. O. Nestoklon*

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences  
194021, Saint Petersburg, Russia*

Received March 4, 2024,  
revised version March 28, 2024,  
Accepted for publication March 29, 2024

We put forward a generalized procedure which allows to restore the bulk-like electron and hole wave functions localized in certain valleys from the wave functions of quantum confined electron/hole states obtained in atomistic calculations of nanostructures. The procedure is applied to the lead chalcogenide quantum dots to accurately extract the intravalley velocity matrix elements and the constants of the effective intravalley Hamiltonian of the exchange interaction for the ground exciton state in PbS and PbSe quantum dots. Our results suggest that intravalley parameters in PbS quantum dots are much more anisotropic than the ones in PbSe. Renormalization of the velocity matrix elements, forbidden band gap, valley and exchange splittings of exciton and exciton binding energy are also calculated.

DOI: 10.31857/S0044451024080121

## 1. INTRODUCTION

Currently, semiconductor-based nanostructures are widely used for various applications. In particular, quantum dots (QDs) [1] offer the tunability of various properties from the basic ones like the effective band gap to more complicated such as exchange interaction in excitons [2] and carrier  $g$ -factor values [3, 4]. Rapid progress of experimental techniques demands for the detailed theoretical insight into properties of semiconductor nanostructures. However, until now there is a gap between purely phenomenological methods based on the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model [5, 6] and atomistic calculations, both empirical [7, 8] and *ab initio* [9, 10]. For the band structure calculations, the interpretation of the atomistic results within the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  framework is straightforward. For nanostructure calculations in most cases additional work has to be done. Observable quantities (splitting energies, optical matrix elements, etc.) are available directly from the atomistic calculations. However, their values typically results from the complex interplay of conceptually different phenomena (mixing of the states at interfaces, anisotropy of effective masses, exchange

interaction, etc.). For the qualitative description and prediction of physical properties of real nanosystems the values of interest are usually the latter ones.

Particularly complex problem is the fine energy structure of the nanostructures of multi-valley semiconductors (e. g. lead chalcogenides, Si, Ge), where such values of interest are blended by the mixing of the valley states. In simple cases, such as SiGe quantum wells [11, 12] or [110]-grown PbX nanowires with the simple surface [13], straightforward parametrization of the valley splitting is possible. Though, in most cases the valley mixing can be taken into account only phenomenologically. In this work we focus on lead chalcogenides and propose a generalized solution to this problem.

Lead chalcogenides PbX, X=S, Se are narrow direct band gap semiconductors suitable for infrared optoelectronic applications [14–16] due to the tunability of the band gap in a wide range of the infrared spectrum. Under normal conditions they have the rock-salt crystal structure with  $O_h^5$  space group and complex multi-valley band structure. Conduction and valence band extrema in PbX are located at the four inequivalent anisotropic  $L$  valleys.

As a result of the broken translational symmetry in lead chalcogenide quantum dots (nanostructures) different  $L$  valley states are mixed and the carriers wave

<sup>\*</sup> E-mail: ivan.avdeev@mail.ioffe.ru



functions are the combinations of the pure valley states [17–19]. The valley mixing spreads the local density of states in  $k$ -space among all the  $L$  valleys [18] and makes it difficult to map the atomistic calculations onto the effective model and vice versa [19]. In particular, the very complex fine structure of the excitons stems from the interplay of spin-orbit splitting, valley-mixing and exchange interaction [19]. This also results in complex behaviour of carriers'  $g$ -factors [3]. The second mechanism responsible for the lifting of the valley degeneracy is the anisotropy of effective masses. The disentanglement of different contributions to the exciton fine structure is further complicated by the strong anisotropy of effective masses in PbX [17, 20] which is, however, can be captured successfully in the framework of the effective  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory, see, e.g., Refs. [21–23].

Below we present our solution of how to trace the valley structure of the ground electron (hole) states in PbX QDs from atomistic calculations to enable direct mapping onto analytical models. The proposed procedure relies on the symmetry analysis and computation of the local density of states in reciprocal space at the four inequivalent  $L$  points in the Brillouin zone. As an example we use the obtained pure valley states to calculate the intravalley anisotropic exchange constants and intravalley interband velocity matrix elements in cubic, cuboctahedral and octahedral PbX quantum dots with tetragonal symmetry, similar to the ones studied in Ref. [19].

We demonstrate that these quantities are almost insensitive to the shape of the quantum dot and agree very well with effective mass calculations. Direct access to the valley states allows us to show that velocity and exchange Coulomb matrix elements in PbS quantum dots are much more anisotropic than in PbSe in the considered range of quantum dot diameters from 3 nm to 25 nm.

## 2. VALLEY STATES

In bulk PbX crystal the valley states are the electron and hole states at the band extrema located at the four inequivalent independent  $L$  valleys. In each valley the states are classified by irreducible representations of the  $L$  valley wave vector point group  $D_{3d}$  [18]. This group has six spinor representations: two two-dimensional  $\Gamma_4^\mp$  and four one-dimensional conjugated  $\Gamma_5^\mp$  and  $\Gamma_6^\mp$  in Koster's notation [24]. These representations are also known as  $L_6^\mp$ ,  $L_4^\mp$  and  $L_5^\mp$  respectively [25]. (Hereafter throughout the paper we use only the Koster's notation.) Since the one dimensional repre-

sentations  $\Gamma_5^\mp$  and  $\Gamma_6^\mp$  are conjugated (related by time inversion) they also form doubly degenerate energy levels  $\Gamma_5^\mp \oplus \Gamma_6^\mp \equiv \Gamma_{56}^\mp$ .

### 2.1. Extended effective mass model

In PbX crystal the ground conduction band edge states are odd and transform according to  $\Gamma_4^-$  ( $L_6^-$ ), while the ground valence band edge states are even and form the basis of  $\Gamma_4^+$  ( $L_6^+$ ) [26]. The center of inversion is assumed to be at cation. The standard basis functions of  $\Gamma_4^\pm$  are (pseudo)spinors [24], therefore we refer the band edge states at the  $L$  valleys as the valley (pseudo)spinors

$$\mathcal{E}_\mu^b = (|b, \mu, \uparrow\rangle, |b, \mu, \downarrow\rangle), \quad (1)$$

where  $b = c, v$  or «-», «+» is the band index,  $\mu = 0, 1, 2, 3$  is the valley index and  $\uparrow, \downarrow$  are the indices of (pseudo)spins oriented along the valley axis. Due to the  $O_h$  rotational symmetry of the bulk PbX crystal the valley (pseudo)spinors in different valleys are not fully independent. Indeed, for any  $g \in O_h$  the functions  $g\mathcal{E}_\mu^b \equiv \mathcal{E}_{\mu'}^b$  are also eigenstates of the bulk Hamiltonian with same energy  $E^b$ , but some at different  $L$  valley  $g\mathbf{k}_\mu \equiv \mathbf{k}'_{\mu'}$ . This allows us to construct the valley (pseudo)spinor basis

$$\mathcal{E}_{VP}^b = (\mathcal{E}_0^b, \mathcal{E}_1^b, \mathcal{E}_2^b, \mathcal{E}_3^b) \quad (2)$$

of the irreducible star of  $L$  valleys with known transformation properties

$$g\mathcal{E}_{VP}^b = \mathcal{E}_{VP}^b D^b(g). \quad (3)$$

We refer it as the ground valley multiplets. The transformation matrices of  $\mathcal{E}_{VP}^b$  can be established explicitly by choosing specific rotations  $g_\mu \in O_h$  to relate the valley states in different valleys, such as  $\mathcal{E}_\mu^b = g_\mu \mathcal{E}_0^b$ . Possible choices for  $g_\mu$  are either the powers of  $S_{4z}$  roto-reflection [19], powers of  $C_{4z}$  [27] or  $C_{2x}, C_{2y}$  and  $C_{2z}$  rotations [3].

When nanostructured the translation symmetry is broken and the eightfold degenerate ground valley multiplets (2) split into several energy levels. The number of levels and their symmetries are determined by decomposition of the transformation matrices  $D^b(g)$ , Eq. (3), into irreducible representations of the symmetry group of the quantum dot (nanostructure). Decomposition of the  $D^b$  matrices is given by symmetrization matrices  $S^b$  via  $S^{b-1} D^b S^b$ . The  $S^b$  matrices are chosen in such a way so the new basis  $\mathcal{E}_{VP}^b S^b = \mathcal{E}_P$

$$\sum_{\mu=0}^4 \sum_{\eta=\uparrow, \downarrow} |b, \mu, \eta\rangle S_{\mu\eta, \Gamma_i F_z}^b = |b, \Gamma_i, F_z\rangle \quad (4)$$

transforms as (pseudo)spin. Here  $|b, \Gamma_i, F_z\rangle$  are the states which transform as the standard basis functions [24] of the irreducible representation  $\Gamma_i$ . Several  $S$  matrices for [111]-nanowires with  $D_{3d}$  point group and QDs with  $T_d$  symmetry were calculated in Refs. [3, 18, 19]. In quantum dots (nanostructures) the symmetry of the ground valley multiplets holds. Indeed, the bulk states may be related to the states in nanostructures in the two-step procedure: (i) formation of combinations of bulk states into states which transform under representations of nanostructure symmetry group and (ii) renormalization of energies of these states due quantum confinement (localization in  $r$ -space and delocalization in  $k$ -space, see [5]).

## 2.2. Empirical tight-binding method

For atomistic calculations of PbX quantum dots (nanostructures) we use the  $sp^3d^5s^*$  nearest neighbour variant of the tight-binding method [17]. In this model the electron and hole wave functions are expanded over the basis of Löwdin orbitals  $|n\xi\rangle$  [28] localized near atomic sites

$$|\Psi\rangle = \sum_{n\xi} C_{n\xi} |n\xi\rangle. \quad (5)$$

Here  $\xi$  describes both spin and one of the  $s, p, d$  or  $s^*$  type of the orbital,  $n$  is the atomic site index. Coefficients  $C_{n\xi}$  are obtained via numerical diagonalization of the tight-binding Hamiltonian, which is represented by a large sparse matrix

$$\hat{H} = \sum_{n\xi n'\xi'} H_{n'\xi'n\xi} |n'\xi'\rangle \langle n\xi|. \quad (6)$$

In the nearest neighbour approximation there are up to  $7 \cdot 2^2 \cdot 10^2 \cdot N_a$  nonzero elements in the matrix, where  $7 = 6 + 1$  is the maximal number of nearest neighbours  $n \neq n'$  plus diagonal  $n = n'$ , 2 is the number of spins, 10 is the number of the  $sp^3d^5s^*$  orbitals and  $N_a$  is the number of atoms in the quantum dot (nanostructure).

Numerical diagonalization of the tight-binding Hamiltonian is performed using the thick-restart Lanczos algorithm [29, 30]. This is efficient iterative method which has linear computational complexity  $\mathcal{O}(m \cdot N_a)$  of finding exactly  $m$  eigenvectors near the band gap. Due to the Kramers symmetry the electron (hole) energy levels  $E_i$  are doubly or quadruple degenerate depending on the point symmetry of the quantum dot (nanostructure). There is some randomness in degenerate tight-binding eigenstates  $|i, p\rangle$  ( $p = 1, \dots, n_i$ ) of Eq. (6)

$$\hat{H} |i, p\rangle = E_i |i, p\rangle \quad (7)$$

since any linear combination of degenerate states is also an eigenstate with the same energy  $E_i$ . For each energy level  $E_i$  these states  $\mathcal{E}_i = (|i, 1\rangle, \dots, |i, n_i\rangle)$  form a basis of an irreducible representation  $\Gamma_i$  of size  $n_i$ . Therefore we can define the *symmetrized* states  $|\Gamma_i, F_z\rangle$  as

$$\sum_p |i, p\rangle V_{p, F_z}^i = |\Gamma_i, F_z\rangle, \quad (8)$$

where  $V^i$  is a unitary matrix and  $|\Gamma_i, F_z\rangle$  are the (pseudo)spin-like states with standard transformation properties [24]. Eq. (8) is readily generalized to any number of energy levels

$$\mathcal{E}_{TB} V = \mathcal{E}_P, \quad (9)$$

where  $\mathcal{E}_{TB} = (\mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n)$  is the set of sets of tight-binding states with energies  $E_1, \dots, E_n$ ,  $\mathcal{E}_P = (\mathcal{E}_{\Gamma_1}, \dots, \mathcal{E}_{\Gamma_n})$  is the set of sets of symmetrized states with standard transformation properties. The matrix  $V = \text{diag}(V_1, \dots, V_n)$  is block-diagonal. Accidental degeneracy of states  $E_i = E_j, i \neq j$  is not considered as may be removed by small perturbation.

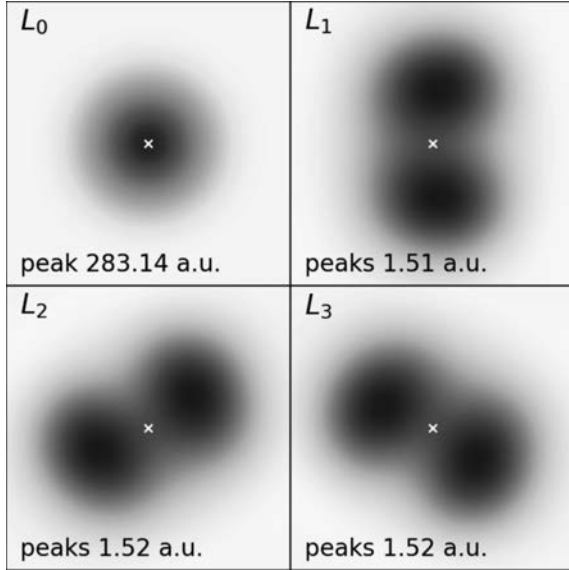
## 2.3. Mapping tight-binding results to effective mass model

The next step is to identify the states of the split conduction and valence band ground valley multiplets in atomistic calculations. In most cases they are simply eight closes to the band gap states in each band. However, a situation when the distance between quantum confined levels is smaller than the splittings of the valley multiples is possible [18]. For such extreme case the states of the ground valley multiplets can be identified in  $k$ -space. As shown in Ref. [18] the ground electron and hole states have the maximum of local density in  $k$ -space exactly at the  $L$  points of the Brillouin zone, while the maximum of excited states is slightly displaced. In centrosymmetric quantum dots (nanostructures) excited states can be also distinguished by their opposite parity.

Finally, we define the conduction (valence) band valley states in PbX quantum dots (nanostructures) by combining Eqs. (4) and (8). In the matrix form it reads as

$$\mathcal{E}_{VP}^b S^b = \mathcal{E}_{TB}^b W^b, \quad (10)$$

where  $\mathcal{E}_{TB}^{c(v)}$  are the raw conduction (valence) band tight-binding states and  $\mathcal{E}_{VP}^b$  are the corresponding valley multiplets similar to Eq. (2). Instead of  $V^b$ , Eq. (8), we introduce a matrix  $W^b$  to account for possible uncertainties of the raw states to enable the inverse transformation to the basis of valley (pseudo)spinors given by



**Fig. 1.** Local density in the k-space of the same  $|c, 0, \uparrow\rangle$  valley state in the Brillouin Zone surface near  $L$  valleys. The exact positions of the  $L_\mu$  valleys are indicated by white «x». The main peak near  $L_0$  valley (upper left) is shown in red colours, while the peaks near the other valleys  $L_1, L_2, L_3$  are shown by blue colours with different scale of the colormap. The values (arb. units) of the maximal peak near each valleys are also indicated on the plots

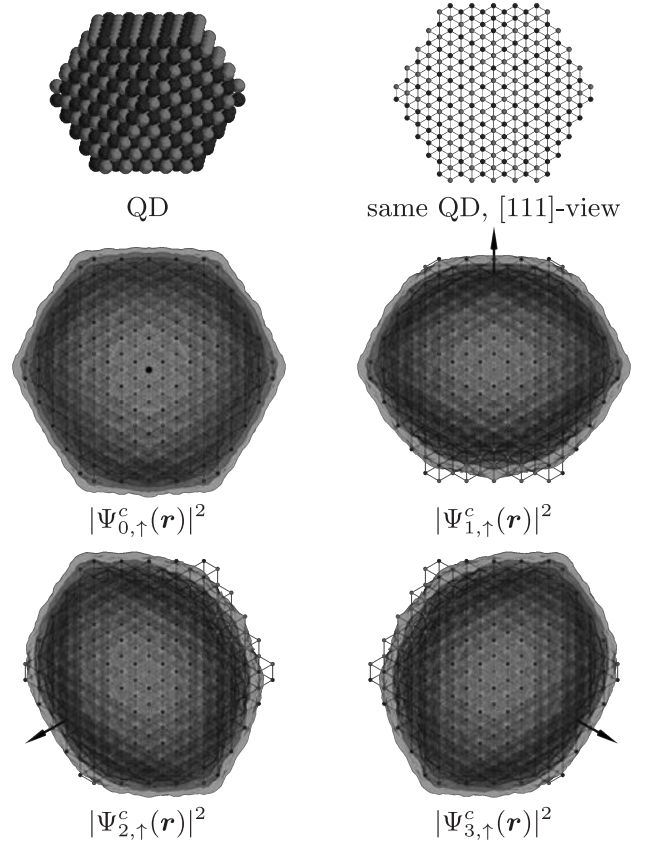
$$U^b = W^b S^{b-1}. \quad (11)$$

We factorize the matrix  $W$  (the band index is omitted for brevity) into three matrices

$$W = VPR, \quad (12)$$

where  $V = \text{diag}(V_{i_1}, \dots, V_{i_N})$ , Eq. (8), brings the tight-binding states to the (pseudo)spin form, the matrix  $P$  arranges the order of irreducible representations and accounts for the phases of their bases and the matrix  $R$  describes the possible rotation between repetitive irreducible representations in the decomposition of the valley multiplet. The matrix  $V$  can be computed as a sum over the point group of the quantum dot (nanos-structure) as described in Appendix 4. The extra matrix  $P$  traces the permutations and phase multipliers for the irreducible representations in the decomposition, see details in Appendix 4. Parametrization of the  $R$  matrix is given in Appendix 4. The unknown phases and rotation angles for  $P$  and  $R$  matrices for the ground valley multiplets can be obtained by the numerical maximization of the local density of states in k-space at the four  $L$  points of the Brillouin zone.

To demonstrate the procedure, we reconstruct the valley states in the small cuboctahedral PbS QD without inversion ( $D \approx 3.2$  nm,  $N = 4, M = 0$  in Ref. [19]).

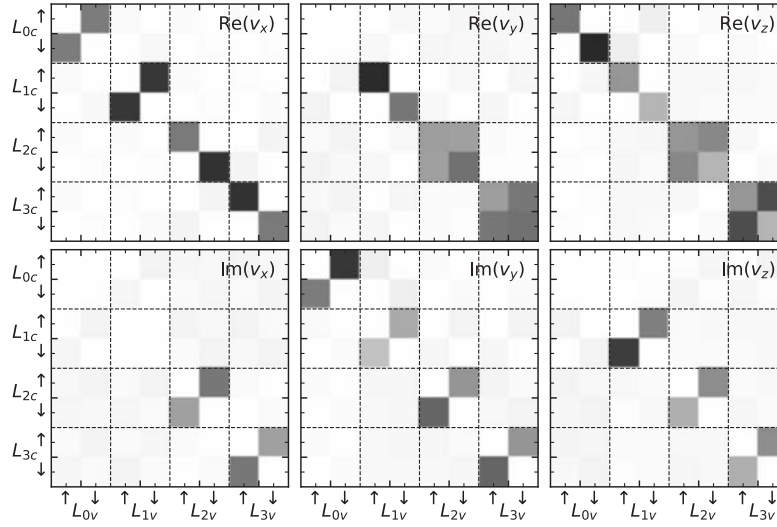


**Fig. 2.** [111]-view of the local densities in r-space of conduction band valley states  $|c, \mu, \uparrow\rangle, \mu = 0, 1, 2, 3$  in the cuboctahedral QD shown at the top (for [111]-view the size of the atoms is reduced). The black arrows indicate the orientation of the corresponding  $L$  valleys

The arrangement of atoms in this QD is shown in the inset of Fig. 2. In tetragonal quantum dots the ground conduction and valence band valley multiplets split into two doublets  $\Gamma_6 \oplus \Gamma_7$  and a quadruplet  $\Gamma_8$ . The only fitting parameters are three discrete phase multipliers for each band. As a result we obtain eight states  $|b, \mu, \eta = \uparrow, \downarrow\rangle$  in each band  $b = c(v)$  localized near  $L_\mu$  valleys. The wave vectors of the  $L$  valleys are chosen as

$$\mathbf{k}_0 \parallel [111], \quad \mathbf{k}_1 \parallel [\bar{1}\bar{1}1], \quad \mathbf{k}_2 \parallel [1\bar{1}\bar{1}], \quad \mathbf{k}_3 \parallel [\bar{1}1\bar{1}]. \quad (13)$$

The 2D local density of the  $|c, 0, \uparrow\rangle$  state in k-space near the  $L$  valleys is shown in Fig. 1. The part of the density near the  $L_0$  valley is shown by red, while the density near other valleys are shown by blue with different scale. The scales of the colormaps are chose from 0 to the maximum of the local density in the corresponding cross section, which are indicated on the plots in arbitrary units. One can see that the main peak at



**Fig. 3.** Interband velocity matrix elements in the basis of valley state  $\langle c, \mu, \eta | \hat{v} | v, \mu', \eta' \rangle$  in the coordinate frame of the  $L_0$  valley, Eq. (15), in QD with  $D \approx 3.2$  nm (see text). Color encodes the amplitude of corresponding matrix elements

the  $L_0$  valley is about 200 times larger than the peaks near other  $L_\mu, \mu = 1, 2, 3$  valleys. Moreover, these 2D plots reveal the admixture of excited states at different valleys since the maxima of their density are misplaced from the  $L$  valleys. The positions of the  $L$  valleys in Fig. 1 are shown by small white «x» at the middle of each plot.

In Fig. 2 we also show the local density of all the valley states  $|c, \mu, \uparrow\rangle, \mu = 0, 1, 2, 3$  in  $r$ -space. To emphasize the difference of the local densities of the valley states they are shown as projections onto the plane perpendicular to the  $[111]$  axis. In this plane projections of the effective masses in  $L_0$  valley are isotropic, while projections of the other valleys  $L_\mu, \mu \neq 0$ , are not. This results in the anisotropy in the projections of the local densities of the  $L_\mu, \mu = 1, 2, 3$ , valley states, which is clearly seen in Fig. 2. The axis of this anisotropy depends on the projection of the corresponding  $L$  valley onto the  $(111)$  plane. The state at the  $L_0$  valley is isotropic in this projection. The density of spin-down and valence band states look very similar.

### 3. RESULTS

We apply the developed method to unwind the valley structure of states in cubic, cuboctahedral and octahedral PbS and PbSe quantum dots with tetragonal symmetry  $T_d$ , similar to the ones studied in Ref. [19]. We show how having the explicit form of the valley multiplets helps to calculate physical properties of these

quantum dots, such as interband velocity matrix elements and intravalley long range exchange Coulomb interaction, which otherwise are not directly accessible.

#### 3.1. Interband velocity matrix elements

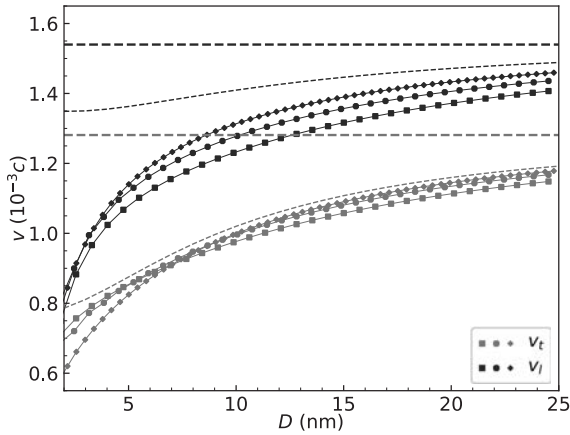
First we consider one of the simplest yet useful property of PbX quantum dots — interband velocity matrix elements  $\langle c | \hat{v} | v \rangle$  between the electron and hole ground levels. Velocity matrix elements in these quantum dots are computed as a commutator of the tight-binding Hamiltonian with the coordinate operator,  $\hat{v} = i[\hat{H}, \mathbf{r}]/\hbar$  and we assume the diagonal approximation  $\mathbf{r} = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \mathbf{r}_n$  where  $\mathbf{r}_n$  is the coordinate of  $n$ -th atom [31]. Since the transformation of the tight-binding states to the valley (pseudo)spinors (10) given by the matrix  $U^b, b = c, v$  (11), then the corresponding transformation of the velocity matrix elements is given by

$$\mathbf{V}_{VP} = U^{c\dagger} \mathbf{V}_{TB} U^v. \quad (14)$$

Result of this transformation is shown in Fig. 3 for the same  $D \approx 3.2$  nm cuboctahedral PbS quantum dot, which atomistic structure is shown in inset of Fig. 2. In Fig. 3 the interband velocity matrix elements are given in the valley (pseudo)spin basis in the coordinates frame

$$n_{0x} \parallel [\bar{1}\bar{1}0], \quad n_{0y} \parallel [11\bar{2}], \quad n_{0z} \parallel [111] \quad (15)$$

of the  $L_0$  valley. Upper panels show real part of  $v_x, v_y, v_z$  (from left to right) components of the velocity matrix elements, lower panels show imaginary parts.



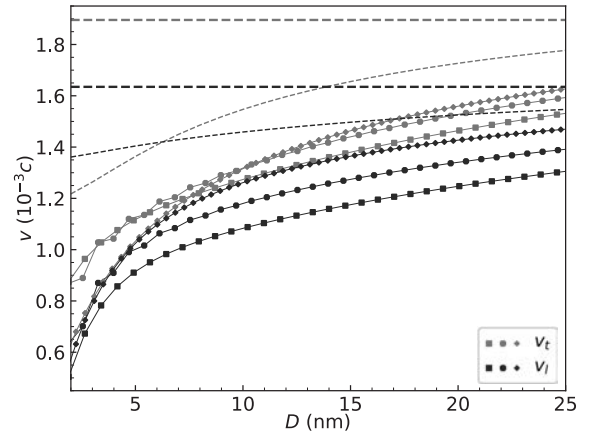
**Fig. 4.** Intravalley interband velocity matrix elements  $v_t, v_l$  in  $10^{-3}$  speed of light in PbS QDs with different shapes as a function of effective QD diameter. Results of the tight-binding calculations are shown by symbols connected by thin solid lines. The shape of the symbols represent the shape of the QDs: cubic, cuboctahedral and octahedral. Results of the calculations in the framework of anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory are shown by thin dashed lines. Dashed lines show the corresponding interband velocity matrix elements in the bulk crystal

The absolute values of velocity matrix elements are indicated by colour (positive by red, negative by blue, zero by white), the scale of the colormap is same for all the subplots. The upper left corner in each subplot correspond to the intravalley velocity matrix elements in the  $L_0$  valley. One can clearly see that the spin matrices of the velocity operator in the  $L_0$  valley are proportional to the Pauli matrices,  $\hat{v}_i \propto \sigma_i$ . The absolute values of the velocity matrix elements in  $L_0$  valley,  $v_x = v_y \neq v_z$ , represent the internal anisotropy of the valley. One can also see there are traces of non-diagonal by the valley index optical transitions. The intervalley interband velocity matrix elements are non-zero due to the admixture to the ground valley states of excited states in other valleys seen in Fig. 1. This is a second order perturbation with respect to the valley splitting and it vanishes very quickly with increase of the size of the quantum dot (nanostructure).

The structure of the velocity matrix elements in the basis of valley states, Fig. 3, allows us directly calculate their values as

$$\begin{aligned} v_x &= \text{Re} \langle c, 0, \downarrow | \hat{v}_x | v, 0, \uparrow \rangle, \\ v_y &= \text{Im} \langle c, 0, \downarrow | \hat{v}_y | v, 0, \uparrow \rangle, \\ v_z &= \text{Re} \langle c, 0, \uparrow | \hat{v}_z | v, 0, \uparrow \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Results of the calculations are shown in Fig. 4 for PbS and in Fig. 5 for PbSe quantum dots in thousandths of the speed of light. Longitudinal ( $v_l \equiv v_z$ ) intraval-



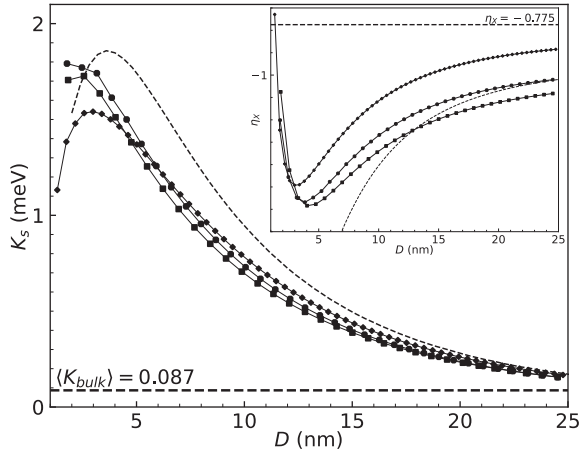
**Fig. 5.** Same as in Fig. 5 for PbSe QDs

ley interband velocity matrix elements are shown by blue, transverse ones ( $v_t \equiv v_x = v_y$ ) by red. Tight-binding data are shown by symbols connected by thin solid lines for each of the three considered shapes of the quantum dots: cubic by  $\langle \square \rangle$ , cuboctahedral by  $\langle \circ \rangle$  and octahedral by  $\langle \diamond \rangle$ . For the detailed description of the atomistic structure and shapes of the quantum dots see Ref. [19]. Solid dashed lines show the corresponding velocity matrix elements in bulk PbS and PbSe crystals. Data calculated within the framework of fully anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model [3] are shown by thin dashed lines.

These plots, Figs. 4 and 5, reveal the scaling of the internal valley anisotropy in isotropic PbS and PbSe quantum dots. One can clearly see that velocity matrix elements almost insensitive to the shape of the quantum dots and converge to the corresponding values in bulk crystal at large diameters. Also these plots reveal that intravalley velocity matrix elements in PbSe quantum dots are almost isotropic in the range of diameters from about 5 nm to 15 nm, compared to to their PbS counterparts. Another interesting result is that anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory for spherical quantum dots fails a bit to predict the scaling of the longitudinal component of the velocity at small diameters, especially for PbS.

### 3.2. Intravalley exchange interaction

The second application of the valley pseudospinors considered in this paper is the calculation of intravalley anisotropic long range exchange Coulomb interaction constants. These constant are calculated here for the same PbS and PbSe quantum dots as in Sec. 3.1 and Ref. [19].



**Fig. 6.** In the main plot the averaged intravalley exchange constant  $K_s$  is shown as a function of QD diameter. Inset shows the intravalley exchange anisotropy parameter  $\eta_X$  as a function of QD diameter. Results of the tight-binding calculations are shown by symbols connected by thin solid lines. The shape of the symbols represent the shape of the QDs: cubic, cuboctahedral and octahedral. Results of the calculations in the framework of anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory are shown by thin dashed lines. Thick dashed lines show the corresponding values in the bulk crystal (see Table 1)

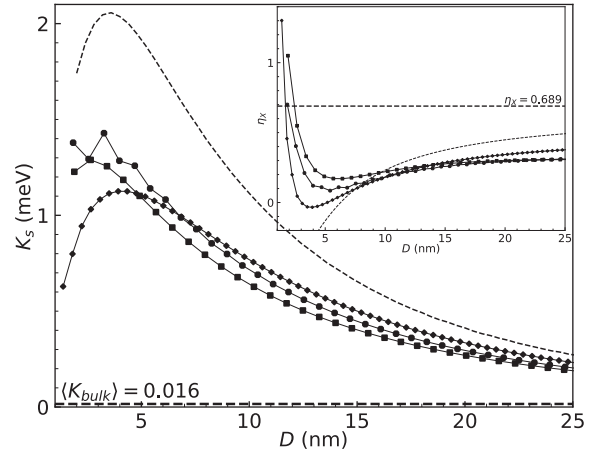
The problem with calculation of intravalley exchange interaction constants is the complicated interplay of intra- and intervalley Coulomb interaction and the valley mixing of electron, hole and exciton states. The full exciton Hamiltonian in PbX quantum dots has four main contributions

$$\hat{H}_X = \hat{H}_0 + \hat{H}_{VM} - \hat{J} + \hat{K}, \quad (17)$$

where  $\hat{H}_0 \equiv E_g(D)\mathbb{1}$  describes the quantum confinement of electrons and holes,  $\hat{H}_{VM}$  is the valley mixing,  $\hat{J} \equiv J\mathbb{1}$ ,  $J > 0$  is the direct Coulomb interaction and  $\hat{K}$  is the long range exchange [19]. The quantum confinement and direct Coulomb are trivial diagonal parts of the Hamiltonian. The exciton fine structure is defined by the valley mixing  $\hat{H}_{VM}$  and exchange interaction  $\hat{K}$ . It was shown in Ref. [19] that intra- and intervalley exchange are equally important and a phenomenological model for the exchange matrix  $\hat{K}$  was proposed. The model is isotropic with one exchange constant  $K(D)$  which can be calculated analytically. In this model the electron-electron representation of the long range exchange Hamiltonian in one  $L$  valley is

$$\hat{H}_{\text{exch}}^{\text{iso}} = K \left( \frac{\mathbb{1}}{2} - \frac{\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}}{6} \right), \quad (18)$$

where  $K$  is the exchange constant and the spin matrix results from the angular parts of exchange integrals on



**Fig. 7.** Same as in Fig. 6 but for PbSe QDs

the spherically symmetric electron and hole wave functions. The model also takes into account the valley splittings as external parameters and allows to calculate absorption spectrum of the ground exciton level which is then can be compared to the similar spectra in tight-binding. Comparison of the phenomenological model and tight-binding absorption spectra in PbS quantum dots was used in Refs. [19] and [32] to estimate the exchange constant in the tight-binding. The obvious drawback of this approach is that it requires a fitting procedure to minimize the difference between absorption spectra. This approach is not accurate.

In this work we calculate the intravalley exchange interaction constants straightforwardly fully taking into account the valley anisotropy. As discussed in Sec. 2 the  $L$  valley states, Eq. (1), transform according to  $\Gamma_4^-$  and  $\Gamma_4^+$  irreducible representation of the wave vector group  $D_{3d}$  in conduction and valence bands, respectively. Therefore in the direct product  $\Gamma_4^- \otimes \Gamma_4^+ = \Gamma_1^- \oplus \Gamma_2^- \oplus \Gamma_3^-$  there are two one-dimensional,  $\Gamma_1^-$ ,  $\Gamma_2^-$ , and one two-dimensional,  $\Gamma_3^-$  irreducible representations, each corresponding to an exchange constant  $K_s$ ,  $K_l$  and  $K_t$ . As a result, the electron-electron representation of the Hamiltonian of the anisotropic intravalley exchange interaction has the following form

$$\hat{H}_{\text{exch}}^{\text{aniso}} = K_s \frac{\mathbb{1}}{2} - K_t \frac{(\sigma_x^* \sigma_x + \sigma_y^* \sigma_y)}{6} - K_l \frac{(\sigma_z^* \sigma_z)}{6}. \quad (19)$$

Here we used same spin matrices as in Eq. (18). For the known intravalley exchange matrix the exchange constants  $K_s$ ,  $K_t$  and  $K_l$  are calculated as

$$K_s = \frac{\text{Tr}(\hat{H}_{\text{exch}}^{\text{aniso}})}{2}, \quad K_{t(l)} = -\frac{3 \text{Tr}(M_{t(l)}^* \hat{H}_{\text{exch}}^{\text{aniso}})}{2}, \quad (20)$$

where  $M_t = \sigma_x^* \sigma_x$  or  $\sigma_y^* \sigma_y$  and  $M_l = \sigma_z^* \sigma_z$ . Since the energy of the dark excitons are not shifted by the exchange [33], it is natural to expect that

$$K_s = \frac{2K_t + K_l}{3} \quad (21)$$

and the eigenvalues of  $\hat{H}_{\text{exch}}^{\text{aniso}}$  are

$$E_s = 0, \quad E_t = \frac{K_t + K_l}{3}, \quad E_l = \frac{2K_t}{3}. \quad (22)$$

The intravalley part (19) of the full  $64 \times 64$  exchange Hamiltonian can also be calculated via the inverse transformation (11). For the  $v \otimes c$  exciton indexing scheme the transformation of exciton states is given by the direct product  $U^{v*} \otimes U^c$ .

Results of the calculations are shown in Fig. 6 for PbS and in Fig. 7 for PbSe cubic, cuboctahedral and octahedral QDs with tetragonal symmetry. Instead of  $K_s, K_t, K_l$  in Figs. 6 and 7 we show  $K_s(D)$  and the long range exchange anisotropy parameter

$$\eta_X(D) = \frac{K_l(D) - K_t(D)}{K_s(D)}. \quad (23)$$

Tight-binding data are shown by symbols connected by thin solid lines for each of the three considered shapes of the QDs: cubic by «□», cuboctahedral by «◻» and octahedral by «◊». Detailed description of the atomistic structure and shapes of the QDs are given in Ref. [19]. Data calculated within the framework of fully anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model [3] are shown by thin dashed lines. One can see that the intravalley exchange is almost insensitive to the shape of the QDs and does not oscillate with the change of the QD diameter. The tight-binding results agree well with anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory. Details of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  calculations are given in Appendix 4.

The asymptotic values for  $\eta_X$  may be calculated from  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory [34, 35]. The longitudinal-transverse splitting reads as

$$\hbar\omega_{LT} = \frac{8e^2\hbar^2 P^2}{\varepsilon_\infty m_0^2 E_g^2 a_B^3} \quad (24)$$

where  $a_B$  is the exciton Bohr radius and  $\varepsilon_\infty$  is the high frequency dielectric permittivity, see Table 1. It may be shown that the effect of the valley anisotropy may be fully accounted by considering the direction-dependent longitudinal-transverse splitting

$$\hbar\omega_{LT}^{l(t)} = \frac{8e^2\hbar^2 P_{l(t)}^2}{\varepsilon_\infty m_0^2 E_g^2 a_B^3}. \quad (25)$$

**Table 1.** Main components of longitudinal-transverse long range exchange exciton splittings, anisotropic material parameters for bulk PbS and PbSe, high-frequency dielectric permittivity and exciton Bohr radius.  $\alpha_{t(l)}^b$  are remote band contributions [3]. Interband momentum matrix elements  $P_{t(l)}$  are given in atomic units.

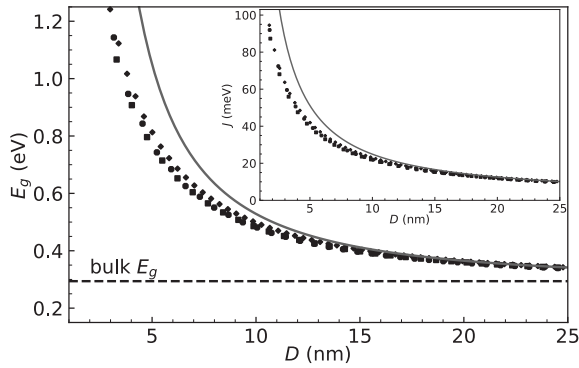
	PbS	PbSe
$\hbar\omega_{LT}^t$ ( $\mu\text{eV}$ )	76	19
$\hbar\omega_{LT}^l$ ( $\mu\text{eV}$ )	110	11
$\langle\hbar\omega_{LT}\rangle$ ( $\mu\text{eV}$ )	87	16
$\eta_X$	-0.775	0.689
$P_t$ (atomic)	0.1756	0.2699
$P_l$ (atomic)	0.2110	0.2243
$E_g$ (eV)	0.294	0.213
$\alpha_t^v m_0/\hbar^2$	3.713	3.618
$\alpha_l^v m_0/\hbar^2$	0.481	0.784
$\alpha_t^c m_0/\hbar^2$	3.359	3.006
$\alpha_l^c m_0/\hbar^2$	0.697	0.946
$\varepsilon_\infty$ [36]	19.2	26.9
$a_B$ (nm) [37–39]	18	46

Then, the anisotropy of the main components of longitudinal-transverse splitting of the exciton is

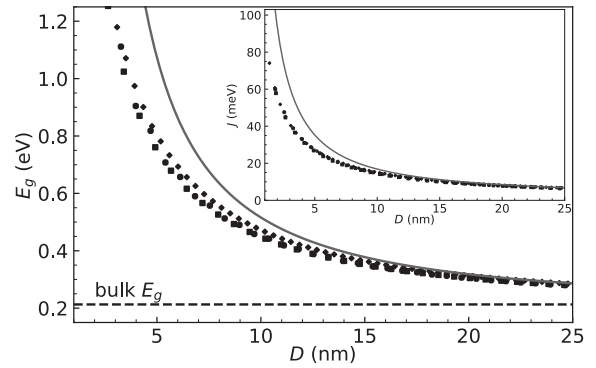
$$\eta_X = \frac{\omega_{LT}^l - \omega_{LT}^t}{\langle\omega_{LT}\rangle} = 6 \frac{P_t^2 - P_l^2}{2P_t^2 + P_l^2}. \quad (26)$$

The values of  $\eta_X$  for bulk PbS and PbSe are also given in Table 1.

Similarly to the intravalley exchange, Eq. (19), one can also compute the non-diagonal intervalley parts  $\hat{H}_{\text{exch}}^{\mu\mu'}$ ,  $\mu \neq \mu'$  of the full exchange Hamiltonian. The magnitude of the intervalley exchange in highly symmetric quantum dots is almost identical to the intravalley one  $|\hat{H}_{\text{exch}}^{\mu\mu'}| \sim |\hat{H}_{\text{exch}}^{\mu\mu}|$ , so the full exchange Hamiltonian is almost isotropic and also leads to the formation of the ultra-bright valley-symmetric superradiant exciton triplet as was shown in simplified model in Refs. [19] and [27]. However, the intervalley exchange has very complicated non-analytical form and we do not present it here. The only difference with the isotropic approximation is that the valley anisotropy leads to the brightening of some dark triplets. Though, their oscillator strength is still two order of magnitude smaller and the use of isotropic model [19] is fully justified.



**Fig. 8.** Main plot: low temperature band gap energy, Eq. (27), as a function of effective diameter in octahedral, cubeoctahedral and cubic PbS QDs. Dashed line indicate the band gap of the bulk PbS. Inset: the upper estimate for the exciton binding energy in PbS QDs. In both plots symbols show the data calculated in tight-binding, solid lines show  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  results



**Fig. 9.** Same as in Fig. 8, but for PbSe QDs

### 3.3. Electron and hole energy spectra, exciton binding energies

In this section we discuss energy spectrum of electrons, holes and exciton binding energies in PbX QDs. As mentioned above, in PbX QDs with  $T_d$  point symmetry the electron (hole) ground states are split into two doublet levels  $\Gamma_6, \Gamma_7$  and a quadruplet  $\Gamma_8$ . Following Ref. [19] we associate the electron (hole) ground confinement energy with the energy of the quadruplet state  $E_{\Gamma_8}$ . This allows to fully parametrize the valley splittings by two energy differences between doublet levels,  $E_{\Gamma_6}, E_{\Gamma_7}$ , and the quadruplet level  $E_{\Gamma_8}$ . In this notation the band gap energy reads as

$$E_g(D) \equiv E_{\Gamma_8}^c(D) - E_{\Gamma_8}^v(D) \quad (27)$$

and the valley splittings are

$$E_{\Gamma_7}^b(D) - E_{\Gamma_8}^b(D), \quad E_{\Gamma_8}^b(D) - E_{\Gamma_6}^b(D), \quad b = c, v. \quad (28)$$

The band gap energy  $E_g(D)$ , Eq. (27), is shown in the main plot in Fig. 8 for PbS and in the main plot in Fig. 9 for PbSe QDs. Results of the tight-binding calculations are shown by black symbols. The shapes of the QDs are indicated by the shape of the symbols similar to Figs. 6 and 7. Band gap of the bulk PbS and PbSe crystals, see Table 1, indicated by dashed lines. Solid lines show the band gap calculated in the framework of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory in isotropic approximation, see Appendix 4.

Parameters of the valley splittings, Eq. (28), are shown in Fig. 10 for PbS and 11 for PbSe QDs. Due

to the fast decay of the valley splitting energies they are shown on logarithmic scale. The shape of QDs in Figs. 10 and 11 are indicated by shape of the symbols and color: red for octahedral, green for cubeoctahedral and blue for cubic QDs. Negative values are shown by hollow symbols, positive ones by filled. One can see that the lowest values of the valley splittings are in octahedral QDs, their signs oscillate with the change of the QD size parameter  $N$ , see Ref. [19] for details. The largest values of the valley splitting are in cubic QDs, they do not oscillate.

Insets in Figs. 8 and 9 show the estimate for the exciton binding energy  $-\hat{J} = J\mathbb{1}$ , see Eq. (17), given by the direct Coulomb interaction constant  $J > 0$  in PbS and PbSe QDs, respectively. Results of the tight-binding calculations are shown by black symbols. Results of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  calculations are shown by solid lines.

In tight-binding the direct Coulomb is calculated using the same technique with the same high-frequency dielectric constant as for the exchange term. Similar approach is used for  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  calculations, see details in Appendix 4. This yields the upper estimate for the exciton binding energy since the static dielectric constant  $\epsilon_0$  in PbX is about ten times larger than the high frequency one  $\epsilon_\infty$  [36]. One can see that the upper estimate for the exciton binding energy is about an order in magnitude smaller than the effective band gap in PbS and PbSe QDs, which correlates well with the large observed exciton Bohr radii in these materials.

### 3.4. Valley and exchange exciton splittings

The splitting of the ground exciton level is controlled by the valley mixing  $\hat{H}_{VM}$  and long range exchange  $\hat{K}$  Hamiltonians (17). Interplay of these two contributions was thoroughly investigated in Ref. [19].



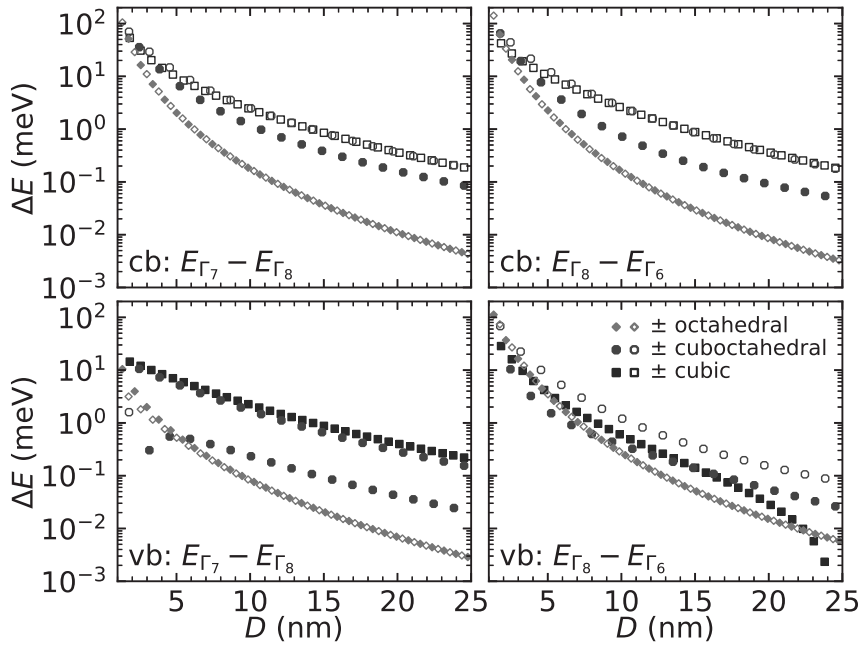


Fig. 10. Valley splitting energies, Eq. (28), in octahedral (red), cuboctahedral (green) and cubic (blue) PbS QDs. Data is shown on logarithmic scale. Filled symbols show positive values of the splitting energies, hollow symbols show negative ones

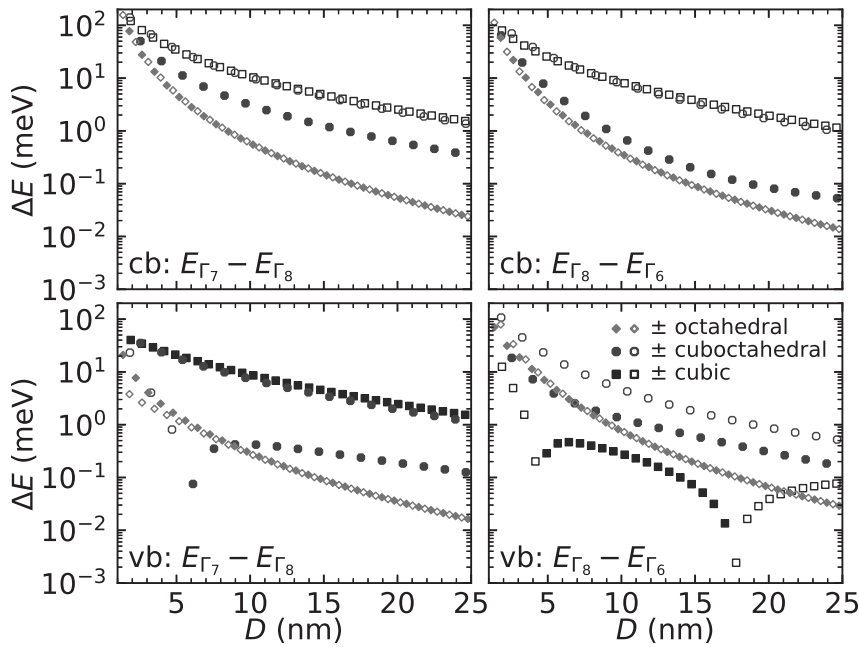
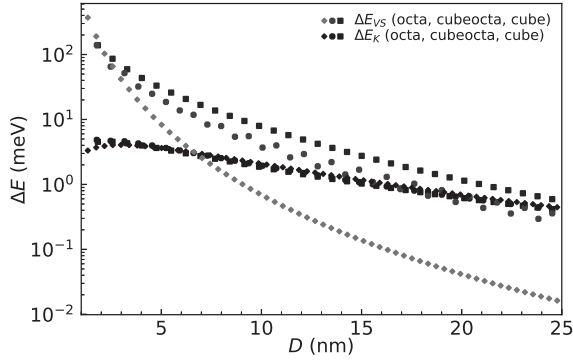


Fig. 11. Same as in Fig. 10, but for PbSe QDs

Here we present the comparison of the two contributions and focus on their scaling as a function of the QD diameter.

The total splitting of the exciton fine structure due to the valley mixing,  $\hat{H}_{VM}$ , neglecting exchange is given



**Fig. 12.** Total exciton splitting due to the valley mixing of states  $\Delta E_{VS}$ , Eq. (29), and total exciton exchange splitting  $\Delta E_K$ , Eq. (30).  $\Delta E_{VS}$  is shown by color symbols: red for octahedral QDs, green for cuboctahedral QDs and blue for cubic QDs.  $\Delta E_K$  is shown by black symbols. In both cases the shape of the QDs is also indicated by the shape of the symbols, similarly to Fig. 6

by distance between furthest exciton levels

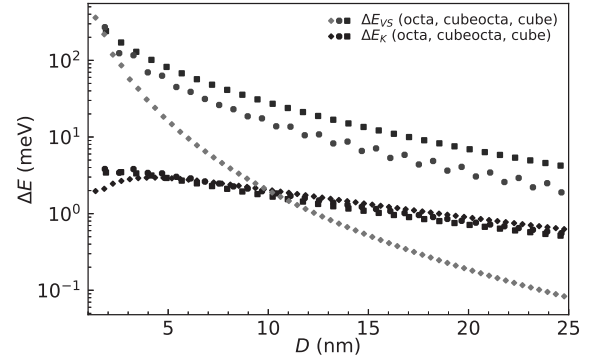
$$\Delta E_{VS} = \sum_{b=c,v} \max(E_{\Gamma_6}^b, E_{\Gamma_7}^b, E_{\Gamma_8}^b) - \min(E_{\Gamma_6}^b, E_{\Gamma_7}^b, E_{\Gamma_8}^b). \quad (29)$$

As discussed in Ref. [19], neglecting the valley mixing, the exchange Hamiltonian  $\hat{K}$  leads to the formation of the ultra-bright exciton triplet split by

$$\Delta E_K = \frac{8K_s}{3} \quad (30)$$

from the manifold of the dark exciton levels, where  $K_s$  is the averaged (isotropic) intravalley exchange constant, see Eq. (21). Due to the cubic ( $T_d$ ) symmetry of the considered QDs, the exchange Hamiltonian  $\hat{K}$  does not split the exciton triplets despite the pronounced anisotropy of the intravalley exchange constants. However, the internal valley anisotropy of the exchange constant leads to the brightening of another exciton triplet to up to about 1% of the oscillator strength of the ultra-bright exciton triplet. This effect is expected to be more pronounced in anisotropic PbX QDs.

The splittings of the exciton level due to the valley mixing, Eq. (29), and exchange Coulomb interaction, Eq. (30), are shown in Fig. 12 for PbS and in Fig. 13 for PbSe QDs. The total valley splitting  $\Delta E_{VS}$  strongly depend on the shape of the QD and shown by red, green and blue color symbols for octahedral, cuboctahedral and cubic QDs, respectively. The total exchange splitting  $\Delta E_K$  is almost insensitive to the shape of QDs and shown by black symbols. One can see that in cubic and cuboctahedral QDs the total valley splitting is larger than the exchange one for all range of the



**Fig. 13.** Same as in Fig. 12, but for PbSe QDs

computed QD diameters. Therefore in these QDs the exciton fine structure is mostly defined by the valley mixing of states. In octahedral QDs the valley splitting decays much faster. Therefore in small octahedral QDs the exciton fine structure is mostly defined by the valley mixing of states, while in large octahedral QDs the exciton fine structure is dominated by long range exchange interaction.

#### 4. CONCLUSIONS

To conclude, we developed a generalized procedure which allows us to restore the valley states in nanostructures of multivalley semiconductors starting from the quantum confined electron/hole states obtained in atomistic calculations. The method allows for the extraction of the parameters of effective Hamiltonians and/or observables in the physically transparent basis and makes it possible for the direct mapping of the results of atomistic calculations to simplified analytical models.

To demonstrate the strength of the procedure we directly extract the anisotropic exchange constants in PbS and PbSe faceted (cubic, cuboctahedral and octahedral) QDs from the empirical tight-binding calculations and compared the results to the fully anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model. We also showed that in PbSe the intravalley exchange interaction, as well as the intravalley velocity, is almost isotropic, while in PbS it is strongly anisotropic with its longitudinal part being close to zero.

The developed procedure does not depend on particular symmetry, periodicity or valley composition of states of the considered nanostructure and therefore can be applied for any atomistic calculations (including density functional theory) of any multivalley semiconductor nanostructure.

**Acknowledgments.** Authors thank S.V. Goupalov, M.M. Glazov and E.L. Ivchenko for fruitful discussions. The work of IDA was supported by Russian Science Foundation under grant no. 22-72-00121. IDA also thanks the Foundation for Advancement of Theoretical Physics and Mathematics «BASIS».

**APPENDIX A.  
SYMMETRIZATION**

Let  $\mathcal{E} = (\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_d)$  be the basis of an irreducible representation  $\Gamma$  of a finite group  $G$  of size  $N$ , which transforms  $\forall g \in G$  as  $g\chi_i = \chi_j T_{ji}(g)$  or  $g\mathcal{E} = \mathcal{E}T(g)$  and  $V$  be a unitary matrix. Then  $\mathcal{E}' = \mathcal{E}V$  also forms the basis of the same irreducible representation, but transforms  $\forall g \in G$  as  $g\mathcal{E}' = \mathcal{E}'D(g)$ , where

$$\forall g \in G : D(g) = V^{-1}T(g)V. \tag{31}$$

*Lemma:* If  $D(g)$  and  $T(g)$  matrices are known, then the matrix  $V$  can be calculated as

$$V_n = \alpha e^{i\frac{2\pi n}{d}} \frac{\tilde{V}}{\det(\tilde{V})^{\frac{1}{d}}}, \tag{32}$$

$$\tilde{V} = \sum_{g \in G} T(g)UD(g^{-1}).$$

Here  $d$  is the dimension of the representation  $\Gamma$ ,  $\alpha$  is a common phase multiplier,  $|\alpha| = 1$ , and  $U$  is a matrix with one or several ones. Additional phase  $\exp(i2\pi n/d)$  and index  $n = 0, \dots, d - 1$  are added explicitly to underline the uncertainty of the root of the complex determinant.

*Proof.* Consider the matrix  $D(g)V^{-1}\tilde{V}$ ,  $g \in G$ . Substituting  $\tilde{V}$  from Eq. (32) we obtain

$$D(g)V^{-1}\tilde{V} = D(g) \sum_{g'} V^{-1}T(g')UD(g'^{-1}). \tag{33}$$

Now using Eq. (31) and expanding  $g'^{-1}$  as  $(gg')^{-1}g \equiv g''^{-1}g$  we transform Eq. (33) to

$$V^{-1} \sum_{g''} T(g'')UD(g''^{-1})D(g) = V^{-1}\tilde{V}D(g). \tag{34}$$

Following the Shur's lemma [40] the matrix  $V^{-1}\tilde{V}$  is proportional to the unit matrix and its trace equals to

$$\text{Tr}(V^{-1}\tilde{V}) = N \text{Tr}(V^{-1}U).$$

Since  $V$  is unitary, then  $V^{-1}$  has at least one nonzero element  $V_{ik}^{-1} \neq 0$ . Let  $U_{jl} = \delta_{jk}\delta_{il}$ , then

$$\text{Tr}(V^{-1}U) = \sum_{l,j} V_{lj}^{-1}U_{jl} = V_{ik}^{-1} \neq 0.$$

Therefore  $\tilde{V} \propto V$ ,  $\det \tilde{V} \neq 0$  and  $V_n$  is unitary matrix satisfying Eq. (31). Notice the proof is very similar to the proof of the great orthogonality theorem [40, 41].

The unknown matrix  $U$  can be found numerically simply by searching through all  $d^2$  square matrices with one nonzero element. The phase multiplier  $\alpha$  is chosen to adjust the time inversion symmetry given by the complex conjugation operator  $\hat{K}$ . Indeed, let  $\hat{K}\mathcal{E} = \mathcal{E}K$ , then

$$\hat{K}\mathcal{E}' = \mathcal{E}'V^{-1}KV^* \equiv \mathcal{E}'K'$$

and the matrix

$$K' \propto \alpha^{*2}.$$

The phase  $\exp(i2\pi n/d)$  should also be adjusted. The sum over the group elements (32) assumes either sum over double group [24] or use of projective representations [40]. In calculations, it is more convenient to sum over all different matrices which can be obtained from the set of matrices of the generators of the group  $G$ , which gives the same result.

Equation (32) can be generalized for projective representations

$$V_n \propto \tilde{V}, \quad \tilde{V} = \sum_{r \in F_k} \frac{T(r)UD(r^{-1})}{\omega(r^{-1}, r)}, \tag{35}$$

where  $r$  are rotations of the point group  $F$  and  $\omega(r, r')$  is the factor system of the irreducible representation [40]. Notice  $\omega$  must be the same for  $T$  and  $D$  matrices, which can be achieved via bringing both  $\omega_T$  and  $\omega_D$  to the standard form. The proof of Eq. (35) is similar, except the following property of the factor system should be used

$$\omega((rr')^{-1}, rr') = \frac{\omega(r'^{-1}, r')\omega((rr')^{-1}, r)}{\omega(r, r')}. \tag{36}$$

This is general property of the factor system [40]

$$\omega(h_1, h_2h_3)\omega(h_2, h_3) = \omega(h_1h_2, h_3)\omega(h_1, h_2), \tag{37}$$

where

$$h_1 = (rr')^{-1}, \quad h_2 = r, \quad h_3 = r'.$$

Formulae Eqs. (32) and (35) can be applied also for reducible representations such as  $\Gamma_{i_1} \oplus \Gamma_{i_2} \dots \oplus \Gamma_{i_N}$  with no repetitive irreducible ones in the sum. Otherwise the Shur's lemma breaks and other techniques should be used. However, this problem is not typical for tight-binding or other atomistic methods, since in most cases each energy level corresponds to single irreducible representation and accidental degeneracies are extremely rare.

### APPENDIX B. INTERCHANGE OF BASIS FUNCTIONS

Let  $\Gamma = \bigoplus_{i=1}^n \Gamma_m$  be a reducible representation of a group  $G$  consisting of  $n$  repetitive equivalent irreducible representations  $\Gamma_m$  of size  $m$ . Let

$$\mathcal{E} = \underbrace{(\mathcal{E}_m^1, \mathcal{E}_m^2, \dots, \mathcal{E}_m^n)}_n, \quad i \neq j \implies \mathcal{E}_m^i \neq \mathcal{E}_m^j, \quad (38)$$

be its basis which transforms under  $g \in G$  as

$$g\mathcal{E} = \mathcal{E}D(g) \equiv \mathcal{E}\mathbb{1}_n \otimes D_m(g) \quad (39)$$

and has time reversal symmetry

$$\hat{K}\mathcal{E} = \mathcal{E}^*T \equiv \mathcal{E}\mathbb{1}_n \otimes T_m(g). \quad (40)$$

Here  $\mathbb{1}_n$  is the  $n \times n$  unit matrix.

The basis (38) is not unique. Indeed, consider an interchange of basis functions

$$\mathcal{E}' = \mathcal{E}U \quad (41)$$

given by a matrix  $U$ . To satisfy Eqs. (39) and (40) the new basis should be i) orthonormal  $\mathcal{E}'^\dagger \mathcal{E}' = \mathbb{1}$  and should transform under  $g \in G$  and  $\hat{K}$  by the same matrices ii)  $g\mathcal{E}' = \mathcal{E}'D(g)$  and iii)  $\mathcal{E}'^* = \mathcal{E}'T$ . These conditions constrain the matrix  $U$  to: i)  $U^\dagger U = \mathbb{1}$ , ii)  $\forall g \in G : D(g)U = UD(g)$  and iii)  $UT = TU^*$ . Due to the Schur's lemma [40] and the structure of the transformation matrices  $D(g) = \mathbb{1}_n \otimes D_m(g)$  the matrix  $U$  matrix is a direct product  $U_n \otimes \mathbb{1}_m$  of  $n \times n$  matrix  $U_n$  and the  $m \times m$  unit matrix  $\mathbb{1}_m$ . Since  $T = \mathbb{1}_n \otimes T_m$  the third condition  $UT = TU^*$  requires  $U_n \in O(n)$  to be real orthogonal matrix.

For practical realization we construct the  $U_n$  matrix as a product of  $n(n-1)/2$  Givens rotation matrices  $R_{ij}(\phi)$  [42] and a matrix of phases  $P$  which sets the signs of the basis functions:

$$U_n = P \prod_{i < j} R_{ij}(\tilde{\phi}_{ij}) \quad \text{or} \quad U_n = \left( \prod_{i < j} R_{ij}(\tilde{\phi}_{ij}) \right) P, \quad (42)$$

where

$$\tilde{\phi}_{ij} = \pm \phi_{ij}$$

and

$$P = \text{diag}(1, p_2, \dots, p_n), \quad p_i = \pm 1. \quad (43)$$

Nonzero matrix elements of  $R_{ij}(\phi)$  are

$$\begin{aligned} [R_{ij}(\phi)]_{kk} &= 1, \quad k \neq i, j, \\ [R_{ij}(\phi)]_{ii} &= [R_{ij}(\phi)]_{jj} = \cos(\phi), \\ [R_{ij}(\phi)]_{ji} &= -[R_{ij}(\phi)]_{ij} = \sin(\phi). \end{aligned}$$

### APPENDIX C. COULOMB INTEGRALS IN ANISOTROPIC $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$

To calculate the intravalley exchange anisotropy in  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  we use the anisotropic model and formalism proposed in Ref. [3]. We consider spherical QDs with infinite boundary conditions. The anisotropic  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  Hamiltonian is expanded into three terms

$$\hat{H}^{\text{aniso}} = \hat{H}^{\text{iso}} + \delta\hat{H}_P + \delta\hat{H}_\alpha, \quad (44)$$

where  $\hat{H}^{\text{iso}}$  is the isotropic part of the Hamiltonian,  $\delta\hat{H}_P$  accounts for the anisotropy of the interband momentum matrix elements and  $\delta\hat{H}_\alpha$  accounts for the anisotropic far-band contributions to the effective masses, see Ref. [3] for details.

Eigenstates of  $\hat{H}^{\text{aniso}}$  are expanded over finite basis of the solutions of the isotropic Hamiltonian  $\hat{H}^{\text{iso}}$

$$\Psi_s^{\text{aniso}} = \sum_{p=1}^N C_p^s \Psi_p^{\text{iso}} \quad (45)$$

and the coefficients  $C$  are found via diagonalization of the full  $N \times N$  matrix  $\hat{H}_{qp}^{\text{aniso}}$ . Here indices  $q, p$  enumerate both valence and conduction band states. The isotropic wave functions [3]

$$\Psi^{\text{iso}} \equiv |F, p, n, F_z\rangle = \begin{pmatrix} f_{F-\frac{p}{2}, p}(r) \hat{\Omega}_{F, F_z}^{F-\frac{p}{2}} \\ i p g_{F+\frac{p}{2}, p}(r) \hat{\Omega}_{F, F_z}^{F+\frac{p}{2}} \end{pmatrix} \quad (46)$$

are bispinors characterized by four quantum numbers: total angular momentum  $F$ , its projection  $F_z$ ,  $p = \pm 1$  and main quantum number  $n$  which enumerates the roots of dispersion equation.  $\hat{\Omega}$  are spherical spinors. The parity of bispinor (46) is given by  $\pi = (-1)^{F+\frac{p}{2}}$ . To catch the exchange anisotropy in our calculations we limit ourselves with two ground confinement levels per band for each  $F = 1/2$  and  $3/2$  ( $N = 24$  states total).

Using the ansatz (45) the exchange matrix elements [19] become sums of integrals on  $\Psi_p^{\text{iso}} \equiv |p\rangle$

$$H_{ia, jb}^X = \sum_{pqrs=1}^N C_p^{j*} C_q^{a*} C_r^b C_s^i \langle pq|rs\rangle \quad (47)$$

which are evaluated numerically. The total number of integrals scales as  $N^4$ , which is 331776 for  $N = 24$ .

To reduce the number of integrals to compute we utilize the angular selection rules and employ the index permutation symmetry. For a general four-index Coulomb integral  $\langle pq|rs\rangle$  there is particle permutation symmetry  $\langle pq|rs\rangle = \langle qp|sr\rangle$ , and  $\langle pq|rs\rangle = \langle rq|ps\rangle = \langle ps|rq\rangle$  if the matrix elements are

real. In our case the matrix elements are real therefore one has to compute only the matrix elements which satisfy one of the following inequalities:

$$\begin{cases} p \leq r \leq q \leq s, \\ p < r \leq s < q, \\ p \leq q < r \leq s, \\ p < q \leq s < r, \\ p \leq s < r \leq q, \\ p < s < q < r. \end{cases} \quad (48)$$

These inequalities reduce the number of double integrals to be evaluated for Eq. (57) up to four times. Combined with angular symmetry the total number of different integrals reduces to 298.

The explicit form of the exchange integral (47) is

$$\langle pq|rs \rangle = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty} \int \frac{d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_p^*(\mathbf{x}_1) \Psi_q^*(\mathbf{x}_2) \Psi_r(\mathbf{x}_1) \Psi_s(\mathbf{x}_2), \quad (49)$$

where  $\int d\mathbf{x} = \int d\mathbf{r} \sum_\sigma$  is the spatial integral and the sum over the bispinor indices  $\sigma$ . Using the Fourier decomposition of  $1/r$  the Coulomb integral (49) reduces to

$$\langle pq|rs \rangle = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi^2 k^2} I_{pr}(\mathbf{k}) I_{qs}(-\mathbf{k}), \quad (50)$$

where

$$I_{uv}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left( f_u f_v \hat{\Omega}_{u,-}^\dagger \hat{\Omega}_{v,-} + p_u p_v g_u g_v \hat{\Omega}_{u,+}^\dagger \hat{\Omega}_{v,+} \right). \quad (51)$$

Here  $f(r), g(r)$  are smooth envelopes,  $\hat{\Omega}_\pm \equiv \hat{\Omega}_{F, F_\pm}^{F \pm \frac{p}{2}}$ , are spherical spinors and indices  $p, q, r, s$  and  $u, v$  denote all four quantum numbers of the isotropic wave functions (46). By introducing [43]

$$\hat{\Omega}_{J_1 M_1}^{L_1 \dagger} \hat{\Omega}_{J_2 M_2}^{L_2} = \sum_{L=|L_1-L_2|}^{L_1+L_2} W_{L, M_1, M_2} Y_{L, -M_1+M_2}, \quad (52)$$

observing (numerically) that

$$\hat{\Omega}_{J_1 M_1}^{J_1 + \frac{p_1}{2} \dagger} \hat{\Omega}_{J_2 M_2}^{J_2 + \frac{p_2}{2}} = \hat{\Omega}_{J_1 M_1}^{J_1 - \frac{p_1}{2} \dagger} \hat{\Omega}_{J_2 M_2}^{J_2 - \frac{p_2}{2}}, \quad (53)$$

and using the plane wave expansion

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{l,m}^*(o_{\mathbf{k}}) Y_{l,m}(o_{\mathbf{r}}) \quad (54)$$

we further simplify  $I_{uv}$  to

$$I_{uv}(\mathbf{k}) = \sum_{L=|L_u-L_v|}^{L_u+L_v} 4\pi i^L W_{L, M_u, M_v} Y_{L, -M_u+M_v}(o_{\mathbf{k}}) J_{uv}^L(k), \quad (55)$$

where  $L_u = F_u \pm p_u/2$ ,  $L_v = F_v \pm p_v/2$  and

$$J_{uv}^L(k) = \int_0^R r^2 dr j_L(kr) [f_u f_v + p_u p_v g_u g_v]. \quad (56)$$

Finally we reduce the Coulomb integral (50) to the sum of double integrals

$$\begin{aligned} \langle pq|rs \rangle &= 8 \delta_{-M_p+M_r, M_q-M_s} (-1)^{-M_q+M_s} \times \\ &\times \sum_{L=L_{\min}}^{L_{\max}} W_{L, M_p, M_r} W_{L, M_q, M_s} \int_0^\infty dk J_{pr}^L(k) J_{qs}^L(k), \end{aligned} \quad (57)$$

where the  $L$  limits are

$$\begin{aligned} L_{\min} &= \max(|L_p - L_r|, |L_q - L_s|), \\ L_{\max} &= \min(L_p + L_r, L_q + L_s). \end{aligned} \quad (58)$$

Now the numerical integration is straightforward.

#### APPENDIX D. ISOTROPIC K·P MODEL, DIRECT COULOMB INTERACTION

The simplified isotropic variant of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model is described in details in supplemental materials for Ref. [19]. It was shown in Ref. [19] that the isotropic model successfully predicts the energy of the ground quadruplet  $\Gamma_8$  in both bands for both octahedral, cubeoctahedral and cubic PbS QDs. Therefore the model is used here to calculate the band gap energy and exciton binding energy (direct Coulomb interaction constant) for all the considered PbS and PbSe QDs.

**Table 2.** Isotropic parameters for bulk PbS and PbSe. Momentum matrix elements are given in atomic units.  $E_g$  and anisotropic parameters are given in Table 1

	PbS	PbSe
$P$ (atomic)	0.1881	0.2556
$a^v m_0 / \hbar^2$	2.635	2.674
$a^c m_0 / \hbar^2$	2.472	2.320

Parameters of the isotropic model are obtained via averaging of the anisotropic ones over the solid angle

$$P = \sqrt{\frac{2P_t^2 + P_l^2}{3}}, \quad \alpha^b = \frac{2\alpha_t^b + \alpha_l^b}{3}, \quad b = c, v. \quad (59)$$

These parameters are listed in Table 2.

Following Ref. [3] the conduction (valence) band ground states with projection  $F_z$  are

$$|c, F_z\rangle = \left| F = \frac{1}{2}, +1, n = 0, F_z \right\rangle,$$

$$|v, F_z\rangle = \left| \frac{1}{2}, -1, n = 0, F_z \right\rangle,$$

where  $|F, p, n, F_z\rangle$  are bispinors (46). The explicit form of conduction (valence) ground bispinors are

$$\Psi^c \equiv \begin{pmatrix} f_c(r) \hat{\Omega}_{\frac{1}{2}, F_z}^0 \\ ig_c(r) \hat{\Omega}_{\frac{1}{2}, F_z}^1 \end{pmatrix},$$

$$\Psi^v \equiv \begin{pmatrix} f_v(r) \hat{\Omega}_{\frac{1}{2}, F_z}^1 \\ -ig_v(r) \hat{\Omega}_{\frac{1}{2}, F_z}^0 \end{pmatrix}.$$

Straightforward calculation of direct Coulomb matrix elements (50) yields

$$J = -E_b > 0,$$

$$J = \frac{2e^2}{\pi\epsilon_\infty} \int_0^\infty dk I_0^v(k) I_0^c(k), \quad (60)$$

where

$$I_0^b(k) = \int_0^R dr r^2 j_0(kr) (|f_b|^2 + |g_b|^2), \quad b = c, v. \quad (61)$$

## REFERENCES

1. A. L. Efros and L. E. Brus, *ACS Nano* **15**, 4, 6192 (2021).
2. P. Tamarat, E. Prin, Y. Berezovska, A. Moskalenko, T. P. T. Nguyen, C. Xia, L. Hou, J.-Baptiste Trebbia, M. Zacharias, L. Pedesseau, C. Katan, M. I. Bodnarchuk, M. V. Kovalenko, J. Even, and B. Lounis, *Nature Communications* **14**, 229 (2023).
3. I. D. Avdeev, S. V. Goupalov, and M. O. Nestoklon, *Phys. Rev. B* **107**, 035414 (2023).
4. M. O. Nestoklon, K. Erik, D. R. Yakovlev, E. A. Zhukov, M. M. Glazov, M. A. Semina, E. L. Ivchenko, E. V. Kolobkova, M. S. Kuznetsova, and M. Bayer, *Nano Lett.* **23**, 8218 (2023).
5. J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
6. P. C. Sercel and K. J. Vahala, *Phys. Rev. B* **42**, 3690 (1990).
7. A. Zunger, *Quantum Theory of Real Materials*, Kluwer International Series in Engineering and Computer Science **348**, 173 (1996).
8. R. Benchamekh, M. O. Nestoklon, J.-M. Jancu, and P. Voisin, *Semiconductor Modeling Techniques*, Springer Series in Materials Science **159**, 19 (2012).
9. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, B864 (1964).
10. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev. A* **140**, A1133 (1965).
11. T. B. Boykin, G. Klimeck, M. Friesen, S. N. Copper-smith, P. von Allmen, F. Oyafuso, and S. Lee, *Phys. Rev. B* **70**, 165325 (2004).
12. M. O. Nestoklon, L. E. Golub and E. L. Ivchenko, *Phys. Rev. B* **73**, 235334 (2006).
13. I. D. Avdeev, *Phys. Rev. B* **99**, 195303 (2019).
14. S. Liangfeng, J. J. Choi, D. Stachnik, A. C. Bartnik, B.-R. Hyun, G. G. Malliaras, T. Hanrath, and F. W. Wise, *Nature Nanotech.* **7**, 369 (2012).
15. V. Sukhovatkin, S. Hinds, L. Brzozowski, and E. H. Sargent, *Science* **324**, 1542 (2009).
16. W. A. Tisdale, K. J. Williams, B. A. Timp, D. J. Norris, E. S. Aydil, and X.-Y. Zhu, *Science* **328**, 1543 (2010).
17. A. N. Poddubny, M. O. Nestoklon, and S. V. Goupalov, *Phys. Rev. B* **86**, 03532 (2012).
18. I. D. Avdeev, A. N. Poddubny, S. V. Goupalov, and M. O. Nestoklon, *Phys. Rev. B* **96**, 08531 (2017).
19. I. D. Avdeev, M. O. Nestoklon, and S. V. Goupalov, *Nano Lett.* **20**, 8897 (2020).
20. A. Svane, N. E. Christensen, M. Cardona, A. N. Chantis, M. van Schilfgaarde, and T. Kotani, *Phys. Rev. B* **81**, 24512 (2010).
21. A. C. Bartnik, A. L. Efros, W.-K. Koh, C. B. Murray, and F. W. Wise, *Phys. Rev. B* **82**, 19531 (2010).
22. S. V. Goupalov, *Phys. Rev. B* **84**, 03730 (2011).
23. S. V. Goupalov, *Nanoscale* **15**, 1230 (2023).
24. G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, *The Properties of the Thirty-Two Point Groups*, M.I.T. Press, Cambridge (1963).

25. J. O. Dimmock and G. B. Wright, *Phys. Rev. A* **135**, 821 (1964).
26. I. Kang and F. W. Wise, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 1632 (1997).
27. S. V. Goupalov, E. L. Ivchenko and M. O. Nestoklon, *Phys. Rev. B* **106**, 12530 (2022).
28. P.-O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **18**, 365 (1950).
29. A. M. Abdel-Rehim, R. B. Morgan, D. A. Nicely, and W. Wilcox, *SIAM J. Sci. Comp.* **32**, 129 (2010).
30. M. O. Nestoklon, R. Benchamekh, and P. Voisin, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 30580 (2016).
31. E. L. Ivchenko and M. O. Nestoklon, *JETP* **94**, 644 (2002).
32. I. D. Avdeev, M. O. Nestoklon, and S. V. Goupalov, *Nano Lett.* **22**, 7751 (2022).
33. S. V. Goupalov, P. Lavallard, G. Lamouche, and D. S. Citrin, *Fiz. Tverd. Tela* **45**, 730 (2003).
34. S. V. Gupalov, E. L. Ivchenko, and A. V. Kavokin, *JETP* **86**, 388 (1998).
35. S. V. Gupalov and E. L. Ivchenko, *Phys. Sol. State* **42**, 2030 (2000).
36. J. N. Zemel, J. D. Jensen and R. B. Schoolar, *Phys. Rev. A* **140**, 330 (1965).
37. I. Moreels, K. Lambert, D. Smeets, D. De Muynck, T. Nollet, J. C. Martins, F. Vanhaecke, A. Vantomme, C. Delerue, G. Allan, and Z. Hens, *ACS Nano* **3**, 3023 (2009).
38. F. W. Wise, *Acc. Chem. Res.* **33**, 773 (2000).
39. E. Lifshitz, M. Bashouti, V. Kloper, A. Kigel, M. S. Eisen, and S. Berger, *Nano Lett.* **3**, 857 (2003).
40. G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley (1974).
41. A. Zee, *Group theory in a nutshell for physicists*, Princeton Univ. Press (2016).
42. D. S. Matteson and R. S. Tsay, *J. Amer. Stat. Association* **112**, 623 (2017).
43. D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific (1988).

# BKT TRANSITION IN PHYLLOTAXIS

*S. K. Nechaev* <sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> *LPTMS, CNRS–Université Paris-Saclay  
91405 Orsay Cedex, France*

Received January 23, 2024,  
revised version May 8, 2024,  
Accepted for publication May 12, 2024

We explore a two-parameter renormalization group (RG) within the framework of the «energetic approach» introduced by L. Levitov, for the phyllotaxis model. Our focus lies on an equilibrium distribution of strongly repulsive particles situated on the surface of a finite cylinder. We investigate how these particles redistribute as the cylinder undergoes compression along its axis. Specifically, we construct the modular-invariant  $\beta$ -function for the system, which is explicitly expressed in terms of the Dedekind  $\eta$ -function. Utilizing this  $\beta$ -function, we derive equations that describe the RG flow near the bifurcation points, which mark the boundaries between different lattice configurations. By analyzing the structure of these RG equations, we assert the emergence of Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transitions under significant cylinder compression.

DOI: 10.31857/S0044451024080133

## 1. INTRODUCTION

Amazing connection of cell packing with Fibonacci sequences, known as phyllotaxis [1] was observed a long time ago in the works of naturalists and remains till now one of the most known manifestations of number theory in natural science. The generic description of growing plants based on symmetry arguments allowed researchers to uncover the role of Farey sequences in the plant’s structure formation (see, for example, [2–4]), however, the question why the nature selects the Fibonacci sequence, among other possible Farey ones, was hidden until modern time. A tantalizing answer to this question has been given by L. Levitov in 1990 in [5], who proposed an «energetic» approach to the phyllotaxis, suggesting that the development of a plant is connected with an effective motion along the optimal path on a Riemann surface associated with the energetic relief of growing tissue.

The energetic mechanism suggested in [5] was applied later in [6] to the investigation of the geometry of flux lattices pinned by layered superconductors. It has been shown that under the variation of a magnetic field, the structure of the flux lattice can undergo a sequence of rearrangements encoded by the

Farey numbers. However, lattices emerging in sequential rearrangements are characterized by the specific subsequence of the Farey set, namely, by the Fibonacci numbers. Very illuminating experiments have been provided in [7] for lattice formed by drops in rotating liquid, and in [8] for the equilibrium structure of a «magnetic cactus».

The general classification of RG flows rhymes with the development of bifurcations («catastrophes») over time in the theory of dynamical systems — see, for instance [9]. In the catastrophe theory there are focuses, saddles, limits cycles and other attributes of the singularity theory, with corresponding fixed points, RG cycles and more exotic RG behavior. For instance, recently the RG counterparts of homoclinic orbits in the theory of dynamical systems have been found in the field theory [10], they also provide examples of chaotic RG flows [11]. The phenomenon of incommensurability is also known in the theory of dynamical systems. Following the same logic, one could expect the existence of RG counterpart of the incommensurability. Indeed, the RG approach was successful in describing the incommensurable patterns in a Harper equation for the electron in a crystal in presence of a magnetic field [12, 13] where it was argued that the tunneling in the phase space is the crucial ingredient.

In an overwhelming majority of physical systems [14, 15] the incommensurability manifests itself in an emergence of a «Devil’s staircase». The geometric

\* E-mail: sergei.nechaev@gmail.com



signature of the incommensurability is the Riemann–Thomae (RT) function which emerges in spectra of sparse systems of various physical origin. Meanwhile, the Riemann–Thomae function also appears as a probability distribution in a plethora of fundamental problems, such as stability diagram in fractional quantum Hall effect [16, 17], interactions of non-relativistic ideal anyons with rational statistics in the «magnetic gauge» approach [18], quantum  $1/f$  noise and Frenel-Landau shift [19], distribution of quotients of reads in DNA sequencing experiment [20], frequency of specific subgraphs counting in the protein-protein network of a *Drosophilla* [21]. Though the degree of similarity with the original RT function could vary, and experimental profiles may drastically depend on the peculiarities of each particular physical system, a general probabilistic scheme resulting in emergence of the fractal hierarchical distribution can be considered as the manifestation of number-theoretic laws in nature.

Often two real parameters of a 2D RG flow are combined into the single complex parameter,  $\tau$ , which can be interpreted as the modulus of the complex structure for an auxiliary elliptic curve. The familiar examples are: the Anderson localization problem with the time symmetry breaking (TSB) term [22], the integer quantum Hall effect (IQHE) [23, 24], and the Yang-Mills theory with the TSB  $\theta$ -term [25, 26]. In all these examples the real part of the complex parameter is the TSB parameter. We suggest a bit more general perspective and propose to consider the following generic complex (modular) parameter:

$$z = [\text{topological term}] + i [\text{disorder}], \quad (1)$$

hence we unite the topology and the disorder in the RG flow. At any fixed value  $z = x + iy$  the partition functions of considered systems fully enjoy symmetries of the  $SL(2, Z)$  modular group and hence are the modular functions. However when  $x$  and/or  $y$  run over time and depend on some scale,  $\mu$ , the situation is more subtle. In general, the RG flow involves two  $\beta$ -functions and is described by the set of equations

$$\frac{dx}{d \ln \mu} = \beta_x(x, y); \quad \frac{dy}{d \ln \mu} = \beta_y(x, y) \quad (2)$$

Typically, the disorder term enjoys both the perturbative and non-perturbative renormalizations, while the topological parameter is renormalized only non-perturbatively. There are some known patterns of  $\beta$ -functions with such properties:

1. For the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) transition one has

$$\beta_u = -c_1 uv; \quad \beta_v = -c_2 u^2. \quad (3)$$

2. For the «Russian Doll» model which is the toy example of the system with the cyclic RG flows (see, [27] for review), the RG flow is discrete

$$g_{N+1} = g_N + \frac{1}{N}(g_N^2 + \theta_N^2); \quad \theta_{N+1} = \theta_N. \quad (4)$$

We focus our attention on a specific limit of RG flows when the non-perturbative renormalization coming from instanton-like contributions dominates — see, for example, [13]. This happens in all examples when  $y = \text{Im } z \rightarrow 0$  which means that we are looking at the limit of a weak disorder in some frame, and the modular parameter is mainly governed by the «winding-like» term. The details are model-dependent, however in all cases this term has one and the same physical meaning: it serves for counting topological defects.

One possible pattern behind the Riemann–Thomae function and the Devil’s staircase is as follows. Consider a physical problem, for example the fractional quantum Hall effect (FQHE), and push the system into the particular limit in the parameter space. For FQHE this is the so-called «thin torus limit» — see for example [17]. The system hosts some defects, and in the limit under consideration defects form a lattice which is a Wigner crystal in the thin torus limit of FQHE. Consider now the propagation of a probe particle through the sample which can be investigated, for instance, by analyzing its spectral density. The modular  $SL(2, Z)$  group acts in the parameter space of this system. The imaginary part  $\text{Im } z$  of the modular parameter  $\tau$  gets identified with some function of disorder, while the real part  $\text{Re } z$  corresponds to the chemical potential for the topological charge relevant for the studied problem. The motion of the probe particle in the crystal of defects can be mapped onto the motion in the fundamental domain of  $SL(2, Z)$  and the rearrangements of the lattice can be treated by analyzing the RG flow in the vicinity of transition points which are identified with points of lattice bifurcations. Generally speaking, from the probe particle perspective, the rearrangement of the lattice can be studied by varying the chemical potential of defects (or of their number).

The paper is organized as follows: in Section 2 we define the model, discuss the modular properties of the potential acting between particles, construct the  $\beta$ -function and show explicitly its scale-invariant structure; in Section 3 we derive the RG flow equations in the vicinity of critical (saddle) points and demonstrate

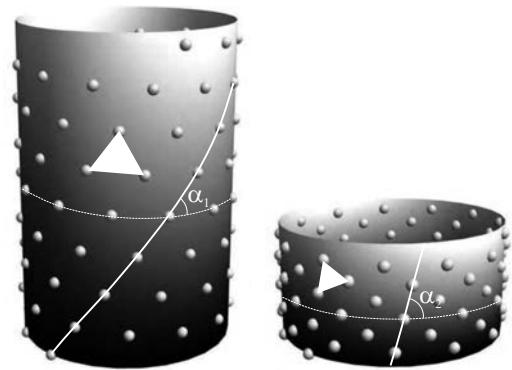
the convergence of these equations at small  $y$  to the ones describing the BKT transition in XY model; finally, in Section 4 we summarize the obtained results and in addition provide arguments showing that the variable  $y$  besides its geometrical sense, can be related to the disorder in a simple spectral problem.

## 2. PHYLLOTAXIS, MODULAR INVARIANCE AND $\beta$ -FUNCTION

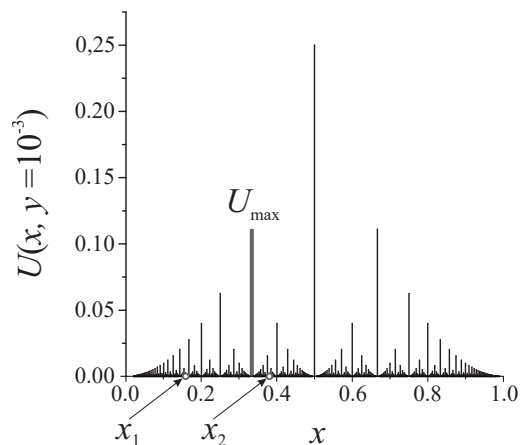
### 2.1. The model

We consider, following L. Levitov [5], the model system of  $N$  strongly repulsive particles disposed and equilibrated at the surface of a cylinder of fixed diameter,  $D$ , and height,  $H$  and look at the rearrangement of these particles when the cylinder is compressed along its height under the condition that  $N$  and  $D$  remain unchanged — see fig.1 a. This model can be regarded as a kind of modification of a famous Tammes problem dealt with a packing a given number of points on the surface of a sphere such that the shortest distance between points is maximized. The Tammes problem is known in plant’s geometry since 1930 [28] and it itself can be viewed as a particular case of the generalized Thomson problem [29] of minimizing the total Coulomb energy of charged particles distributed on the surface of a sphere. The advantage and novelty of L. Levitov’s phyllotaxis model with respect to the Thomson-Tammes system is two-fold: (a) cylindrical lattice is described by two parameters ( $D$  and  $H$ ) and one can change them independently, and (b) the equilibrium lattices on the cylinder are transformed under the action of the group  $SL(2, Z)$ , which essentially simplifies the consideration of rearrangement of lattices when changing  $D$  and/or  $H$ .

At the continuous compression of the cylinder, for each height, particles form a triangular «Abrikosov» lattice with minimal energy [30]. Different lattice topologies correspond to local minima of the system’s energy  $U(x, y)$  and are parametrized by the modular parameter,  $z = x + iy$ , where  $x = f_1(D, H)$ ,  $y = f_2(H)$  and  $f_1$  and  $f_2$  are some functions to be defined below. The minima of the potential  $U(z)$  are clustered in nested basins: larger basins consist of smaller basins, each of these consists of even smaller ones, etc. The basins of local energy minima are separated by a hierarchically arranged set of barriers: large basins are separated by high barriers, and smaller basins within each larger one are separated by lower barriers. The geometry which fixes taxonomic (i.e. hierarchi-



(a)



(b)

**Fig. 1.** *a* — Repulsive points distributed on the surface of the cylinder form a lattice, characterized by the parameter  $\alpha$ , with a minimal energy. The lattice is rearranged when the cylinder is compressed along its vertical axis. *b* — Dependence  $U(x, y = \text{const})$  defined in (13) for the compressed lattice ( $y = 10^{-3} \ll 1$  and  $\beta = 1$ ) as a function of  $x$

cal) tree-like relationships between elements is called «ultrametric» [31].

Here we provide an explicit construction of the energetic relief in a phase space of all possible patterns of compressed lattices and demonstrate that the ground state is related to the deepest valley in  $\Gamma$ . The lattice rearrangement caused by the cylinder compression along its axis is associated with the RG flow on the manifold  $\Gamma$ , which shares the modular properties. At each height,  $H$ , particles on the cylindrical surface form a lattice with a minimal energy. For strongly squeezed lattices ( $y \rightarrow 0$ ) the corresponding energy,  $U(x, y)$ , has a sharp maximum corresponding to the barrier at every rational point,  $x = m/n$  as it is shown in Fig. 1 b. One sees that  $U(x, y)$  demonstrates the hierarchical behav-

ior, which should be understood as follows: the transitions between two arbitrary local minima at  $x_1$  and  $x_2$ , are determined by the passage over the highest barrier  $U_{\max}(x_1, x_2)$ , separating the points  $x_1$  and  $x_2$ .

The outline of our upcoming discussion is as follows. We begin with the derivation of the potential  $U(x, y)$  separating valleys between different equilibrium configurations of particles on the cylinder. Taking into account the invariance of the potential  $U(z)$  under the action of the group  $SL(2, \mathbb{Z})$ , we show that  $U(z)$  plays a role of a  $\beta$ -function of the system. The explicit form of the  $\beta$ -function allows us to derive the RG equations in the vicinity of saddle points of the potential  $U(z)$  and solve these equations in a general form at any  $x$  and  $y$ . Analyzing the structure of obtained RG equations we demonstrate that they tend to the RG equations of  $XY$ -model describing the BKT transition in a strong compression limit (i.e. when  $y \rightarrow 0$ ).

### 2.2. The potential

Any particle on the cylinder can be parameterized by a pair  $(h_n, \alpha_n \pmod{2\pi})$ , where  $n \in \mathbb{N}$ , subject that all particles are arranged according to monotonic growth of the height,  $h_n$ . Projecting the cylindrical surface conformally onto the plane, we get new coordinates,  $\mathbf{r}_{n,m}(x, y)$ , of particles on the planar lattice,

$$\mathbf{r}_{n,m}(x, y) = \left( \frac{m + nx}{\sqrt{y}}, n\sqrt{y} \right), \quad \{m, n\} \in \mathbb{Z}^2, \quad (5)$$

where the connection between cylindrical and planar lattices is set by the following change of variables:

$$x = \frac{\alpha}{2\pi}, \quad y = \frac{h}{2\pi}, \quad y > 0. \quad (6)$$

Strong repulsive potential acting between particles can be approximated by the conformally-invariant  $1/r^2$  potential. Consider two arbitrary particles one of which is located at the origin of the  $(x, y)$ -plane and the second — at some point  $(x_{m,n}, y_{m,n})$ . Suppose that the potential  $U(\mathbf{r}_{m,n})$  has the following form:

$$U(\mathbf{r}_{m,n}) = \frac{q}{r_{m,n}^2}, \quad (7)$$

where  $q > 0$  is some arbitrary parameter having sense of a charge. The energy of a whole lattice reads

$$\begin{aligned} U(x, y) &= \sum_{\{m,n\} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0,0\}} U(x_{m,n}, y_{m,n}) = \\ &= \sum_{\{m,n\} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0,0\}} \frac{q}{r_{m,n}^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Substituting (5) into (7), we get

$$U(x, y) = \sum_{\{m,n\} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0,0\}} \frac{qy}{(m + nx)^2 + y^2n^2}. \quad (9)$$

Recall now the definition of the non-holomorphic Eisenstein series,  $E(z, s)$ , [32]:

$$E(z, s) = \sum_{\{m,n\} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0,0\}} \frac{y^s}{|nz + m|^{2s}}, \quad (10)$$

where  $z = x + iy$  and  $E(z, s)$  is a function of  $z = x + iy$  and is defined in the upper half-plane  $y > 0$  for all  $\text{Re}(s) > 1$ .

The non-holomorphic Eisenstein series of weight 0 and level 1 can be analytically continued to the whole complex  $s$ -plane with one simple pole at  $s = 1$ . Notably  $E(z, s)$ , as function of  $z$ , is the  $SL(2, \mathbb{Z})$ -automorphic solution of the hyperbolic Laplace equation:

$$\begin{aligned} -y^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) E(x, y, s) = \\ = s(1 - s) E(x, y, s). \end{aligned} \quad (11)$$

The residue of  $E(z, s)$  at  $s = 1$  is known as the first Kronecker limit formula [33–35]. Explicitly, it reads at  $s \rightarrow 1$

$$\begin{aligned} E(z, s \rightarrow 1) &= \frac{\pi}{s - 1} + \\ &+ 2\pi \left( \gamma + \ln 2 - \ln \left( y^{1/2} |\eta(z)|^2 \right) \right) + O(s - 1), \end{aligned} \quad (12)$$

where  $\gamma$  is the Euler constant and  $\eta(z)$  is the Dedekind  $\eta$ -function. Equation (12) establishes the important connection between the Eisenstein series and the Dedekind  $\eta$ -function, which we exploit below. Namely, comparing (9) to (10), we conclude that

$$\begin{aligned} U(x, y) \approx qE(x + iy, s \rightarrow 1) \rightarrow \\ \rightarrow 4\pi q \ln \left( y^{1/4} |\eta(x + iy)| \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Let us remind that the Dedekind  $\eta$ -function is defined as follows:

$$\eta(z) = e^{\pi iz/12} \prod_{n=0}^{\infty} (1 - e^{2\pi inz}). \quad (14)$$

The argument  $z = x + iy$  is called the modular parameter, and  $\eta(z)$  is defined for all  $y > 0$ . The function  $\eta(z)$  is invariant with respect to the action of the modular group  $SL(2, \mathbb{Z})$ :

$$\begin{aligned} \eta(z + 1) &= e^{\pi iz/12} \eta(z), \\ \eta\left(-\frac{1}{z}\right) &= \sqrt{-i} \eta(z). \end{aligned} \quad (15)$$

In general,

$$\eta\left(\frac{az+b}{cz+d}\right) = \omega(a,b,c,d) \sqrt{cz+d} \eta(z), \quad (16)$$

where  $ad - bc = 1$  and  $\omega(a,b,c,d)$  is a 24th degree root of unity [36].

### 2.3. The $\beta$ -function

The construction of the  $\beta$ -function implies finding the function which is invariant with respect to RG transformations. The natural candidate for the  $\beta$ -function is the potential  $U(x,y)$ . To see the self-similarity of  $U(x,y)$  along the RG flow (i.e. at  $y$  changing from  $+\infty$  down to 0), we consider the function  $U(x,y|\mathcal{D}_1)$  in some initial domain  $\mathcal{D}_1$  and compare it with its own part  $U(x,y|\mathcal{D}_2)$  in a smaller domain  $\mathcal{D}_2$ . It is always possible to find a conformal transform

$$[(x,y) \in \mathcal{D}_2] \rightarrow [(x',y') \in \mathcal{D}_1]$$

constructed on the basis of generators of  $SL(2, Z)$  such that

$$U(x',y'|\mathcal{D}_2) \rightarrow U(x,y|\mathcal{D}_2).$$

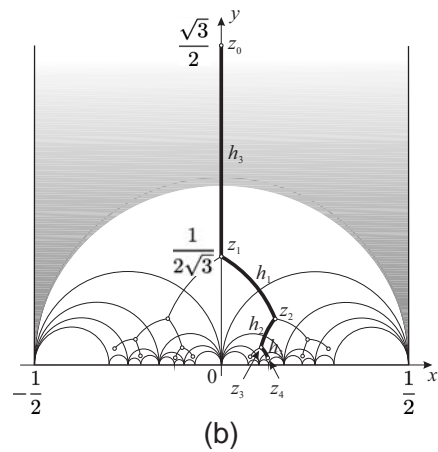
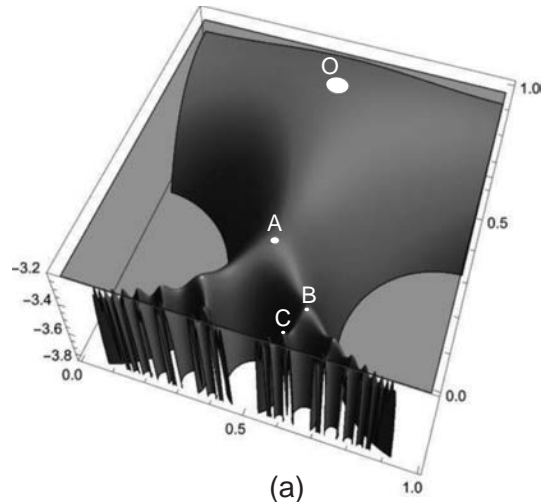
Below we demonstrate the corresponding construction on a particular example.

In Fig. 2 a we provide the generic 3D view of the function  $U(x,y|\mathcal{D}_1)$  (at  $q = 1$ ) in the domain  $\mathcal{D}_1 = (0 < x < 1, 10^{-2} < y < 1)$ . All local maxima,  $(x_j, y_j)$  of the relief  $U(x,y)$  depicted by white points, lie at the level  $U(x_j, y_j) \approx -3.248$ . For better visualization only the part of the function  $U(x,y)$  bounded from below, namely  $U(x,y) > -3.8$  is drawn in Fig. 2 and in Fig. 3 in all panels. Coordinates of particular local maxima shown in Fig. 2 are

$$O\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad A\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right), \\ B\left(\frac{9}{14}, \frac{\sqrt{3}}{14}\right), \quad C\left(\frac{23}{38}, \frac{\sqrt{3}}{38}\right).$$

In Fig. 2 b, we depict a number of fundamental domains of the group  $SL(2, Z)$  together with exact locations of their centers (points  $z_0, z_1, z_2, z_3, z_4$ ) which (up to the shift  $x \rightarrow x + 1/2$ ) exactly match the local maxima of the relief  $U(x,y)$  in Fig. 2 a. We will return to the determination of coordinates of these points at the end of this subsection.

The contour plot of the function  $U(x,y|\mathcal{D}_1)$  in the domain  $\mathcal{D}_1$  is shown in Fig. 3 a. To demonstrate the scale invariance (the self-similarity) of  $U(x,y) \equiv U(z)$ , where  $z = x + iy$ , we select a new (smaller) region,  $\mathcal{D}_2$ , designated by the yellow square in Fig. 3 a and seek for a conformal transform  $z' = f(z)$  which maps  $U(z|\mathcal{D}_2)$  onto  $U(z'|\mathcal{D}_1)$  as it is shown in Fig. 3 a, b.



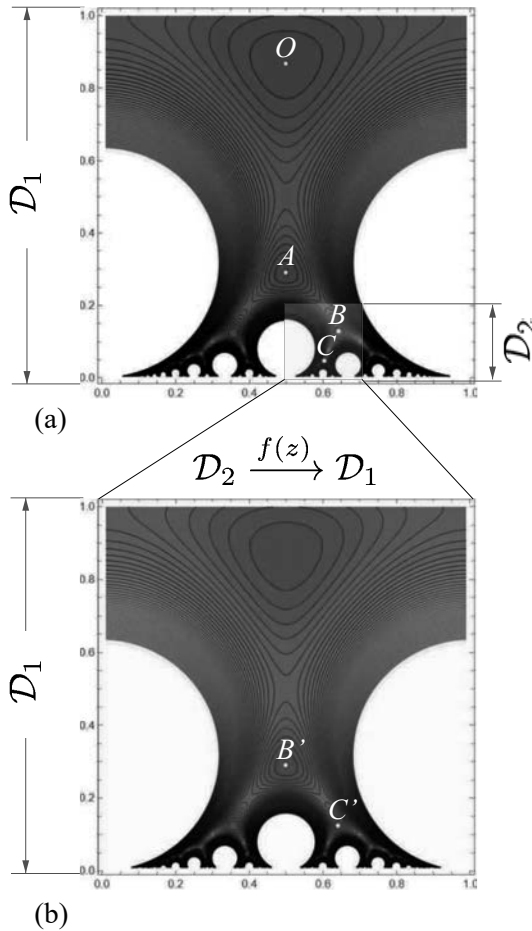
**Fig. 2.** a — 3D view of the function  $U(x,y|\mathcal{D}_1)$  in the domain  $\mathcal{D}_1 = (0 < x < 1, 0 < y < 1)$ . b — For better visualization only the part of the function  $U(x,y|\mathcal{D}_1)$  lying in the interval  $U(x,y|\mathcal{D}_1) > -3.8$  is plotted

For domains  $\mathcal{D}_1 = (0 < x < 1, 10^{-2} < y < 1)$  and  $\mathcal{D}_2 = (x_C - 0.1 < x < x_C + 0.1, 10^{-3} < y < 0.2)$ , where  $x_C = \frac{23}{38}$  is the  $x$ -coordinate of the point  $C\left(\frac{23}{38}, \frac{\sqrt{3}}{38}\right)$ , the mapping  $\mathcal{D}_2 \rightarrow \mathcal{D}_1$  is realized via the conformal transform

$$z' = f(z) = \frac{z-1}{4z-3}. \quad (17)$$

The contour plot of the function  $U(x',y')$  given by (13) is presented in Fig. 3 b. The variables  $(x',y')$  are defined by the following equations:

$$\begin{cases} x' = \text{Re} \frac{z-1}{4z-3} = \frac{3-7x+4x^2+4y^2}{9-24x+16x^2+16y^2}, \\ y' = \text{Im} \frac{z-1}{4z-3} = \frac{y}{9-24x+16x^2+16y^2}. \end{cases} \quad (18)$$



**Fig. 3.** *a* — Contour plot of the function  $U(x, y|D_1)$  in the domain  $D_1 = (0 < x < 1, 0 < y < 1)$ . The function  $U(x, y|D_2)$  in the domain  $D_2$  shown by yellow square in the panel (*a*) is conformally mapped by the function  $f(z)$  (see (17)) onto  $U(x, y|D_1)$  in the domain  $D_1$  as it is shown in the panel (*b*). The corresponding mapping demonstrates the scale invariance of  $U(x, y)$

The variables  $(x, y)$  lie in

$$D_2 = \left( \frac{23}{38} - 0.1 < x < \frac{23}{38} + 0.1, 10^{-3} < y < 0.2 \right).$$

As one sees, the plot in Fig. 3 *b* exactly coincides with the one in Fig. 3 *a* in the whole domain  $D_1 = (0 < x < 1, 0 < y < 1)$ . Substituting  $B \left( x = \frac{9}{14}, y = \frac{\sqrt{3}}{14} \right)$  into (18) we get  $B' \left( x' = \frac{1}{2}, y' = \frac{1}{2\sqrt{3}} \right)$  and for  $C \left( x = \frac{23}{38}, y = \frac{\sqrt{3}}{38} \right)$  we get  $C' \left( x' = \frac{9}{14}, y' = \frac{\sqrt{3}}{14} \right)$  — see Fig. 3. So, we can conclude that the domain  $D_2$  is expanded onto the domain  $D_1$  such that the structure of the potential  $U(x, y)$  remains completely scale-invariant.

Generically all local maxima (points  $z_1, z_2, \dots$  in Fig. 2 *b*) can be constructed via successive reflections of the fundamental domain of the free group  $\Gamma_2$  as it is shown in Fig. 2 *b*. The corresponding Cayley graph is a 3-branching Cayley tree. Recall that the 3-branching Cayley tree can also be viewed as the Cayley graph of the group  $\Lambda$ , which has the free product structure:  $\Lambda \sim \mathbb{Z}_2 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes \mathbb{Z}_2$ , where  $\mathbb{Z}_2$  is the cyclic group of second order. The matrix representation of generators  $h_1, h_2, h_3$  of the group  $\Lambda$  is well known:

$$h_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; h_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; h_3 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ 2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Taking the point,  $z_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}i$ , we can find its image,  $z_N$ , after  $N$  recursive applications of generators from the set  $\{h_1, h_2, h_3\}$  according to the following formula:

$$z_N = \frac{1}{2} + \begin{cases} \frac{a_N \bar{z}_0 + b_N}{c_N \bar{z}_0 + d_N} & \text{for } N = 2k - 1, \\ \frac{a_N z_0 + b_N}{c_N z_0 + d_N} & \text{for } N = 2k, \end{cases} \tag{20}$$

where  $\bar{z}$  means complex conjugation of  $z$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , and  $\{a_N, b_N, c_N, d_N\}$  are the coefficients of the matrix

$$\begin{pmatrix} a_N & b_N \\ c_N & d_N \end{pmatrix} = \overbrace{(h_3 h_1 h_2 h_3 h_1 h_2 \dots)}^{N \text{ terms}} \tag{21}$$

Using (19)–(21) we reproduce the coordinates of the points  $A, B, C$  in Fig. 2. The sequence which converges to the Golden ratio is as follows:

$$\begin{pmatrix} a_{3M} & b_{3M} \\ c_{3M} & d_{3M} \end{pmatrix} = \overbrace{(h_3 h_1 h_2) \dots (h_3 h_1 h_2)}^{N \text{ terms}} = (h_3 h_1 h_2)^{3M}, \tag{22}$$

where  $N = 3M$ ,  $M = 1, 2, 3, \dots$ . The limiting value of  $x_\infty = \text{Re } z_{N \rightarrow \infty}$  is the Golden ratio:

$$z_\infty = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{a_{3M} c_{3M} + b_{3M} d_{3M}}{c_{3M}^2 + d_{3M}^2} = \frac{1}{2} (\sqrt{5} - 1) \approx 0.618034... \tag{23}$$

The sequence of «zigzag» reflections is encoded in the continued fraction expansion of the Golden ratio,  $\phi$ :

$$\phi = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}} \tag{24}$$

where interlacing odd and even «1» correspond to the left and right turns of a zigzag path in Fig. 2 *b*.

### 3. RG EQUATIONS AND A SIGNATURE OF BKT TRANSITIONS

Understanding RG flow as adiabatic particle's dynamics (APD) in a complex potential is very useful in studying the behavior of RG flows in the vicinity of critical points which can be regarded as bifurcation points in the APD problem. Here we derive the corresponding RG equation for the potential

$$U(x, y) = 4\pi q \ln\left(y^{1/4} |\eta(x + iy)|\right)$$

defined in (13). The function  $U(z)$ , where  $z = x + iy$ , plays the role of a  $\beta$ -function which remains invariant under the action of the group  $SL(2, Z)$  in particular when  $y$  tends to 0. Recall, that in the phyllotaxis problem changing  $y$  from  $+\infty$  down to 0 can be interpreted as the re-distribution of repulsive particles (equilibrated at the surface of the cylinder) when the cylinder is squeezed along its axis.

The contour plot of  $U(x, y)$  for  $q = 1$  in the region  $(0.01 < x < 0.99, -0.35 < y < -0.32)$  is shown in Fig. 4 *a*. By  $(x_s(k), y_s(k))$  we denote the coordinates of the saddle points ( $k = 1, 2, \dots$ ), they are shown in cyan in Fig. 4 and have the following generic expression:

$$\begin{aligned} x_s(k) &= \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{m_1^2 + m_2^2}, \\ y_s &= \frac{1}{m_1^2 + m_2^2}, \end{aligned} \tag{25}$$

where  $(m_1, m_2, n_1, n_2)$  are some integers. In particular, in Fig. 4 *a* we have depicted the following points constituting the Fibonacci sequence:

$$\begin{aligned} (x_s(1), y_s(1)) &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \\ (x_s(2), y_s(2)) &= \left(\frac{3}{5}, \frac{1}{5}\right), \\ (x_s(3), y_s(3)) &= \left(\frac{8}{13}, \frac{1}{13}\right), \\ (x_s(4), y_s(4)) &= \left(\frac{21}{34}, \frac{1}{34}\right), \quad \text{etc.} \end{aligned}$$

From the topological point of view there is no difference between all these saddle points, however the orientation of saddles with respect to the  $x$ -axis is different and the

geodesic (dashed cyan curve in Fig. 4 *a*, parameterized by the equation

$$y(x) = \sqrt{\frac{5}{4} - \left(x + \frac{1}{2}\right)^2},$$

crosses saddle points with different  $k$  at different angles. The coordinates  $(x_s(k), y_s(k))$  of saddles which constitute the Fibonacci series are

$$\begin{aligned} (x_s(k), y_s(k)) &= \\ &= \left( \frac{G_1^{2k} - G_2^{2k}}{G_1^{2k+1} - G_2^{2k+1}}, \frac{\sqrt{5}}{G_1^{2k+1} - G_2^{2k+1}} \right), \\ & \quad k = 0, 1, 2, \dots, \infty, \end{aligned} \tag{26}$$

where

$$G_1 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), \quad G_2 = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}).$$

To proceed, we expand the potential  $U(x, y)$  in the vicinity of a saddle point  $(x_s, y_s)$  and find the equation describing the corresponding surface  $U(x, y)$  near  $(x_s, y_s) \equiv (x_s(k), y_s(k))$  (to shorten forthcoming expressions we suppress the index  $k$ ). The Taylor expansion of  $U(x, y)$  up to the second order reads

$$\begin{aligned} U(x - x_s, y - y_s) &\approx U(x_s, y_s) + U_{xx}(x - x_s)^2 + \\ &+ 2U_{xy}(x - x_s)(y - y_s) + U_{yy}(y - y_s)^2, \end{aligned} \tag{27}$$

where the derivatives  $U_{xx}, U_{xy} = U_{yx}$ , and  $U_{yy}$  are taken at the point  $(x_s, y_s)$ . The first derivatives in the Taylor expansion (27) are nullified at the point  $(x_s, y_s)$ , and the condition  $U_{xx}U_{yy} - U_{xy}^2 < 0$  ensures that the point  $(x_s, y_s)$  is actually a saddle. Note also that the term,  $U(x_s, y_s) \equiv U(x_s(k), y_s(k))$ , gives one and the same constant for any  $k$  and therefore can be suppressed. Define now the coefficients

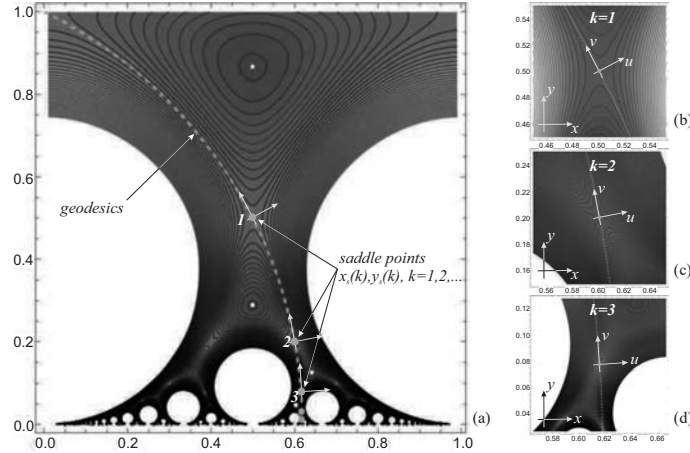
$$U_{xx} = a_1, \quad U_{x,y} = a_2, \quad U_{yy} = a_3$$

at every saddle point. These coefficients,

$$a_1 = a_1(k), \quad a_2 = a_2(k), \quad a_3 = a_3(k),$$

depend on  $k$ , where  $k = 1, \dots, \infty$  in (26).

Derive now the RG flow in the complex  $z = x + iy$  plane in the vicinity of saddle points  $(x_s, y_s)$  of the surface  $U(x, y)$  which plays the role of the  $\beta$ -function, as it has been shown in Section 2.3. Introducing the



**Fig. 4.** Contour plot of the Riemann surface  $U(x, y) = \ln\left(y^{1/4} |\eta(x + iy)|\right)$  in the region  $(0.01 < x < 0.99, -0.35 < y < -0.32)$  (a). White points are the same as in Fig. 3, while cyan points designate the bifurcation points of the RG flow, and the dashed arc is the open geodesics passing through all saddles  $(x_s(k), y_s(k))$  constituting the Fibonacci series  $(k = 0, \dots, \infty)$  — see (26). Plots of the surface  $U(x, y)$  in vicinity of three first saddles  $(x_s(k), y_s(k))$  for  $k = 1, 2, 3$  (b–d)

coordinates  $u = x - x_s$  and  $v = y - y_s$  and separating real and imaginary parts, we may write down the following first-order nonlinear differential equations describing the RG flow in the complex plane  $w = u + iv$ :

$$\begin{aligned} \frac{du}{d \ln \mu} &= a_1 u^2 - a_3 v^2, \\ \frac{dv}{d \ln \mu} &= 2a_2 uv, \end{aligned} \tag{28}$$

where  $\mu$  is the RG time.

Equations (28) imply that the RG flow near the bifurcation points is fully determined by the topology of the  $\beta$ -function  $U(x, y)$ . It is worth mentioning that our construction is consistent with ideas expressed in works [37–39]. In particular, in [37] the connection between the RG flows and the topological structure of the  $\beta$ -function has been discussed in the context of CFT/ADS<sub>2</sub> duality, while in [38] and in [39] the equations for RG flows ideologically similar to (28) have been derived to describe the behavior of RG flows in the FQHE in the vicinity of critical points. The emergence of BKT fixed points in similar context has been also discussed in [40] for layered high- $T_c$  superconductors.

Before proceeding with the derivation of the solution of (28), let us formulate the main idea behind our computations. Comparing the orientation of the  $(u, v)$  coordinate system with respect to  $(x, y)$  one for different  $k$  (see Fig. 4 b, c, d), we can note that with increasing  $k$  the  $(u, v)$ -system is turning in such a way that at  $k \rightarrow \infty$  it coincides with the  $(x, y)$  one. Computing

explicitly the shape  $U(x, y)$  in vicinity of the saddle point  $(x_s(k), y_s(k))$  for  $k = 1, 2, 3$ , we see that with  $k \rightarrow \infty$  the coefficient  $a_1 = U_{xx}$  tends to zero, while the coefficients  $a_2 = U_y$  and  $a_3 = U_{yy}$  remain finite. To demonstrate this, we have depicted in Fig. 4 b, c, d the potentials  $U(x, y)$  in vicinity of first three terms of the Fibonacci series for  $k = 1, 2, 3$ :

$$\begin{aligned} U_1(u, v) &= -3.31 - 0.92u^2 - \\ &\quad - 0.92v^2 + 1.85uv, \\ U_2(u, v) &= -3.31 + 2.60u^2 + \\ &\quad + 23.39v^2 - 15.58uv, \\ U_3(u, v) &= -3.31 - 1.25u^2 - \\ &\quad - 78.65v^2 + 19.77uv. \end{aligned} \tag{29}$$

One sees from (29) that with increasing  $k$  the coefficient  $a_1(k)$  in front of the term  $u^2$  relatively decreases. Returning to (28) we see that when the coefficient  $a_1$  is nullified, the corresponding equation coincides with the equation describing the RG flow in XY model near the BKT transition point. Thus we expect that at  $y \rightarrow 0$  which means strong compression of the fillotaxis lattice the corresponding lattice rearrangements (bifurcations) are closer and closer to the BKT transition.

Let us return now to (28) and provide its generic solution for arbitrary values  $a_1, a_2, a_3$ . Dividing the first equation of (28) by the second one we can convert the system (28) into the following single equation

$$\frac{du}{dv} = \frac{a_1}{2a_2} \frac{u}{v} - \frac{a_3}{2a_2} \frac{v}{u}. \tag{30}$$

Introducing the new function  $h$  and writing  $u = hv$ , we arrive at the equation in which the variables can be separated:

$$v \frac{dh}{dv} = \left( \frac{a_1}{2a_2} - 1 \right) h - \frac{a_3}{2a_2} h^{-1}. \quad (31)$$

Solving (30) we get

$$\frac{a_2}{a_1 - 2a_2} \ln(a_3 - (a_1 - 2a_2)h^2) = \ln(Gv), \quad (32)$$

where  $G$  remains invariant along the RG flow (i. e.  $G$  does not depend on the scale  $\mu$ ). Plugging the function  $h = u/v$  in (32) and denoting  $G^{a_1/a_2-2}$  by  $\Delta$ , we have

$$a_3 v^2 - v^{a_1/a_2} \Delta = (a_1 - 2a_2) u^2. \quad (33)$$

Substituting  $u(v)$  into the second equation in (28) and performing the integration, we obtain an non-explicit solution for  $v(\mu)$

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{a_1 - 2a_2}}{a_1 \sqrt{a_3 v^2 - \Delta v^{a_1/a_2}}} \times \\ & \times \left( (a_1 - 2a_2) a_3 v^2 \sqrt{1 - \frac{\Delta v^{a_1/a_2-2}}{a_3}} \times \right. \\ & \times {}_2F_1 \left( \frac{1}{2}, \frac{a_2}{a_1 - 2a_2}; \frac{a_1 - a_2}{a_1 - 2a_2}; \frac{v^{a_1/a_2-2} \Delta}{a_3} \right) + \\ & \left. + 2a_2 \left( a_3 v^2 - \Delta v^{a_1/a_2} \right) \right) = \ln \mu. \quad (34) \end{aligned}$$

Despite (34) looks rather complicated, it is essentially simplified in the limit of small  $y$ . Substituting  $a_1 = 0$  into (31) we get the set of equations describing the RG flow in the  $XY$ -model in vicinity of the BKT transition. The critical scale (the correlation length) near the transition point is defined by the condition

$$\sqrt{-2a_2 \Delta} \ln \mu_c \sim 1$$

which implies the BKT-like dependence of the correlation length,  $\mu_c$ , on  $\Delta$ :

$$\mu_c \sim e^{1/\sqrt{-2a_2 \Delta}}. \quad (35)$$

One can see from (29) that the coefficient  $a_2$  in front of the  $uv$  term periodically changes the sign. So, one can expect the signature of the BKT-like transition (35) when  $a_2 < 0$ .

The physical meaning of encountered critical behavior could have the following interpretation. When the cylinder is squeezed along its principal axis, the corresponding lattice of repulsive particles experiences a set

of successive rearrangements («bifurcations»). Each bifurcation is a collective effect that is accompanied by the melting of the lattice. Our analysis permits us to conjecture that at least some of these bifurcations in the strong compression limit can be associated with the Berezinsky – Kosterlitz – Thouless transition.

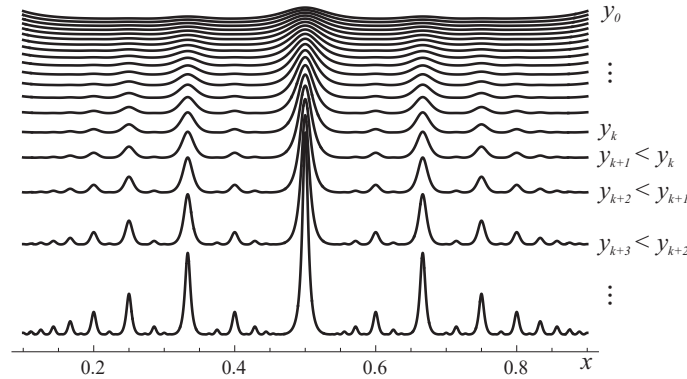
#### 4. DISCUSSION

The main result of our work is as follows: we have provided arguments in support of the conjecture that bifurcations of the lattice formed by strongly repulsive particles equilibrated at the surface of a finite cylinder are the points of phase transitions in the thermodynamic limit. At strong cylinder compression the equations describing RG flow near these transition points converge towards describing the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless behavior in the  $XY$  model. The numerical check of this conjecture is highly demanded since our analysis is not restricted to the specific model of phyllotaxis. Relying on a general topology of the  $\beta$ -function in the vicinity of transition points one could expect the signature of BKT transition in various physical systems such as: (i) layered high- $T_c$  superconductors [40], possessing the Fractional Quantum Hall Transition (FQHT) at small disorder (small  $\sigma_{xx}$ ), (ii) 1D Hubbard model on a ring [41].

The main ingredient in our construction is the lattice potential  $U(x, y)$  defined in (13) which is invariant under the modular transformations and is scale-invariant as it is shown in Section 2.3. The potential  $U(x)$  exhibits a hierarchical structure, with its minima forming clusters of nested basins. Larger basins encompass smaller basins, and this nested pattern continues with each smaller basin containing even smaller ones. The basins hosting local energy minima are delineated by a hierarchical arrangement of barriers, where larger basins are separated by high barriers, and smaller basins within each larger one are divided by lower barriers. The geometric structure that establishes taxonomic relationships between these elements is referred to as «ultrametric» [31]. The self-similarity of the function  $U(x|y)$  is evident from Fig. 5, where we have plotted a set of curves  $U(x)$  at various values of  $y$ . To enhance visualization, the curves at different  $y$  values (ranging from 0.003 to 0.05) have been vertically shifted.

It is worth noting that the form of the generic potential  $U(x|y)$  closely resembles the potential between different energetic minima in a magnetic cactus [43]. We have discovered that the alignment between Fig. 5





**Fig. 5.** Set of plots of  $U(x|y)$  on  $x$  taken at different values of  $y$  in the region  $0.003 < y < 0.05$ . For better view the curves for different  $y$  are shifted in the vertical direction. As smaller  $y$  as more generations of peaks are proliferated

and Fig. 3 in the paper by [42] goes beyond mere coincidence. By considering a more general potential of the form  $W(x|y) = U^p(x|y)$ , where  $0 < p < 1$ , and identifying  $x$  with  $\Omega/(2\pi)$  (see [42]), it becomes possible to fine-tune the parameters  $y$  and  $p$  to precisely match  $W(x|y)$  with the shape of the energetic barriers between equilibrium configurations of the magnetic cactus. This alignment leads us to hypothesize the presence of saddle structures in the potential describing the magnetic cactus, akin to the one depicted in Fig. 2 a. As previously noted, the very occurrence of the BKT-like transition is determined by the saddle-like topology of the  $\beta$ -function near the bifurcation points. Therefore, a model system such as the magnetic cactus holds significant promise as a testing ground for exploring BKT transitions.

The variables  $x$  and  $y$  in the potential  $U(x, y)$  are combined in one complex variable,  $z = x + iy$ , playing a role of a modular parameter. It has been mentioned in the Introduction that typically the real part,  $x$ , has a sense of a «topological term», while the imaginary part,  $y$ , deals with the contribution coming from the «disorder». Besides, the potential  $U(x, y)$  has been constructed in a purely geometric way, and if the coordinate  $x$  has a rather clear topological sense since it is related to the winding angle  $\alpha$  according to (6), the meaning of the coordinate  $y$  as a disorder is far from obvious. To establish the connection of  $y$  with the disorder we demonstrate that the function  $\sqrt{-U(x, y)}$  has an interpretation as a spectral density in a well-known model of a spectral statistics of random walks on ensemble of intervals of length  $n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), and  $n$  is distributed exponentially with the density

$$Q_n(\beta) = (e^\beta - 1)e^{-\beta n}.$$

It is shown below that the corresponding spectral density,  $\rho(\lambda, \beta)$  coincides with the properly normalized value

$$W(x, y) = \sqrt{-U(x, y)}$$

where the following change of variables is implied:

$$x = \frac{1}{\pi} \arccos \frac{\lambda - 2}{2}, \quad 2 \leq \lambda \leq 4, \quad y = g(\beta)$$

(the function  $g(\beta)$  will be discussed below). This relation allows to establish a clear-cut view on the link of  $y$  with the disorder strength,  $\beta$ .

So, consider the spectral statistics of a discrete Laplace operator,  $L$ , on the interval of length  $n$  with the periodic boundary conditions. Our desire is to compute the spectral density  $\rho(\lambda)$  of  $L$  on the ensemble of random intervals distributed with the probability density  $Q_n(\beta)$ , which is nothing else as a discrete formulation of the random walk trapping problem on ensemble of random intervals [43, 44]. The spectrum of the  $n \times n$  periodic three-diagonal Laplacian matrix,  $L_{n \times n}$  with entries

$$[a_{i,i} = 2, a_{i,i+1} = a_{i+1,i} = 1, a_{i,j} = 0,$$

$$\text{otherwise}(\{i, j\} = 1, \dots, n)],$$

reads

$$\lambda_{j,n} = 2 - 2 \cos \frac{\pi j}{n+1}, \quad 1 \leq j \leq n. \quad (36)$$

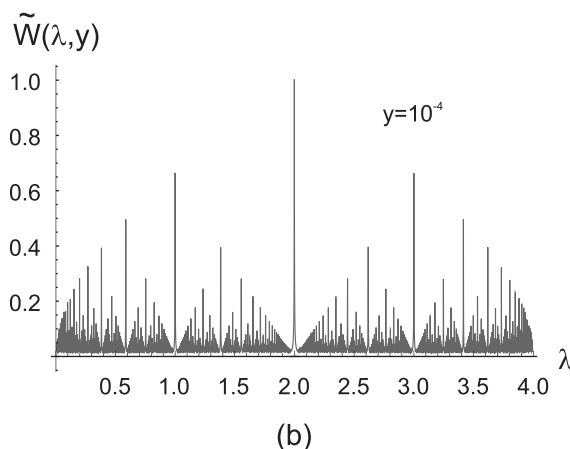
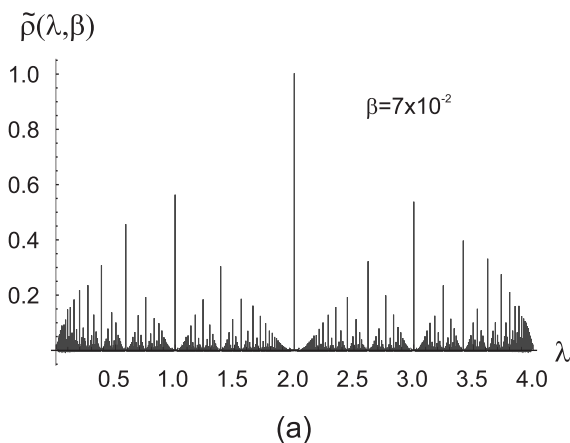
The spectral density  $\rho(\lambda)$  of the ensemble of  $n \times n$  periodic random matrices  $L_{n \times n}$  can be written in a form of a resolvent:

$$\begin{aligned} \rho(\lambda, \beta) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left\langle \sum_{m=1}^n \sum_{j=1}^m \delta(\lambda - \lambda_{j,m}) \right\rangle_{Q_m(\beta)} = \\ &= \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \frac{\varepsilon}{\pi n} \sum_{m=1}^n Q_m(\beta) \sum_{j=1}^m \text{Im} \frac{1}{\lambda - \lambda_{j,m} - i\varepsilon}, \end{aligned} \quad (37)$$

where  $\langle \dots \rangle$  means averaging over the distribution  $Q_m(\beta) = (e^\beta - 1)e^{-\beta m}$ , and the identity

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \text{Im} \frac{1}{x - i\varepsilon} \quad (38)$$

is used to regularize the  $\delta$ -function in (37). Substituting (36) into (37), we find the following expression for  $\rho(\lambda)$ :



**Fig. 6.** *a* — Plot of the function  $\tilde{\rho}(\lambda, \beta)$  for  $n = 200$ ,  $\beta = 7 \times 10^{-2}$ . *b* — Plot of the function  $n = 200$ ,  $\beta = 7 \times 10^{-2}$  for  $y = 10^{-4}$ . The parameters  $\beta$  and  $y$  are adjusted to provide one and the same «resolution cutoff»

$$\begin{aligned} \rho(\lambda, \beta) &= \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \frac{\varepsilon(e^\beta - 1)}{\pi n} \times \\ &\times \sum_{m=1}^n e^{-\beta m} \sum_{j=1}^m \frac{1}{\left(\lambda - 2 + 2 \cos \frac{\pi j}{m+1}\right)^2 + \varepsilon^2} \end{aligned} \quad (39)$$

The function  $\rho(\lambda, \beta)$  lies in the interval  $[0 \leq \lambda \leq 4]$ , is symmetric and has maximum at the point  $\lambda = 2$ . The spectral density  $\rho(\lambda, \beta)$  in Eq.(39) matches at  $0 < \beta \ll 1$  the function  $W(x, y)$

$$W(x, y) = \left(\frac{12y}{\pi}\right)^{1/2} \sqrt{-\ln(y^{1/4}|\eta(x + iy)|)} \quad (40)$$

under the following change of variables in (40):

$$x = \frac{1}{\pi} \arccos \frac{\lambda - 2}{2}, \quad y = g(\beta) \equiv h(n, \varepsilon)\beta,$$

where  $h(n, \varepsilon)$  is some function of  $n$  and  $\varepsilon$  (but not of  $\beta$ ), and  $0 < \beta \ll 1$ . To see this matching, it is convenient to compare the normalized functions,

$$\tilde{\rho}(\lambda, \beta) = \frac{\rho(\lambda, \beta)}{\rho(\lambda = 2, \beta)}, \quad \tilde{W}(\lambda, y) = \frac{W(\lambda, y)}{W(\lambda = 2, y)}.$$

In Fig. 6 *a, b* we have plotted the normalized functions  $\tilde{\rho}(\lambda, \beta)$  (panel (*a*)) with the following set of parameters:  $n = 200$ ,  $\beta = 7 \cdot 10^{-2}$ , and  $n = 200$ ,  $\beta = 7 \cdot 10^{-2}$  (panel (*b*)) for  $y = 10^{-4}$ . The values  $\beta$  and  $y$  are adjusted in such a way that both plots provide one and the same «resolution cutoff» (i. e., number of smallest peaks which can be still resolved).

The parameter  $y$  in (40) has a sense of a «resolution cutoff» of the Dedekind relief. The relation between the strength of the disorder,  $\beta$ , and the cutoff,  $y$ , can be established using the following qualitative arguments. On one hand, the maximal denominator in (39),  $n$ , defines the total number of peaks that can be resolved,  $n_{max}$ . The corresponding resolution cutoff can be estimated as  $n_{max}\beta \sim 1$ . On the other hand, the cutoff  $y$  in (40) can be estimated as  $y \sim 1/n_{max}$ . Thus, in the limit  $\beta \rightarrow 0$  one has a relation  $y \approx \beta$ . Thus, the variable  $y$  at  $y \rightarrow 0$  can be interpreted as an effect of a disorder: as more pure the system ( $\beta \rightarrow 0$ ), as more detailed fractal structure in Fig. 6 (see also Fig. 5) can be seen.

**Acknowledgments.** The author is grateful to Alexander Gorsky and Anna Flack for numerous fruitful discussions and highly acknowledges the hospitality of the staff of UWC Dilijan College for organizing in October 2022 an unforgettable meeting «Statistical mechanics and its applications».

## REFERENCES

1. M. Livio, *The Golden Ratio: The Story of  $\phi$ , the World's Most Astonishing Number*, Broadway Books, New York (2008).
2. F. Rothen and A.-J. Koch, *Phyllotaxis, or the Properties of Spiral Lattices. -I. Shape Invariance Under Compression*, J. de Physique **50**, 633 (1989).
3. F. Rothen and A. J. Koch, *Phyllotaxis or the Properties of Spiral Lattices. - II. Packing of Circles Along Logarithmic Spirals*, J. de Physique **50**, 1603 (1989).
4. M. Kunz and F. Rothen, *Phyllotaxis or the Properties of Spiral Lattices. III. an Algebraic Model of Morphogenesis*, J. de Physique I **2**, 2131 (1992).
5. L. Levitov, *Energetic Approach to Phyllotaxis*, Europhysics Letters **14**, 533 (1991).
6. L. S. Levitov, *Phyllotaxis of Flux Lattices in Layered Superconductors*, Phys. Rev. Lett. **66**, 224 (1991).
7. S. Douady and Y. Couder, *Phyllotaxis as a Physical Self-Organized Growth Process*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2098 (1992).
8. C. Nisoli, N. M. Gabor, P. E. Lammert, J. D. Maynard, and V. H. Crespi, *Static and Dynamical Phyllotaxis in a Magnetic Cactus*, Phys. Rev. Lett. **102**, 186103 (2009).
9. S. Gukov, *RG Flows and Bifurcations*, Nuclear Physics B **919**, 583 (2017).
10. C. B. Jepsen and F. K. Popov, *Homoclinic Renormalization Group Flows, or When Relevant Operators Become Irrelevant*, Phys. Rev. Lett. **127**, 141602 (2021).
11. M. M. Bosschaert, C. B. Jepsen, and F. K. Popov, *Chaotic RG Flow in Tensor Models*, Phys. Rev. D **105**, 065021 (2022).
12. M. Wilkinson, *Critical Properties of Electron Eigenstates in Incommensurate Systems*, Proc. Royal Soc. London A. Math. Phys. Sci. **391**, 305 (1984).
13. M. Wilkinson, *An Exact Renormalisation Group for Bloch Electrons in a Magnetic Field*, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 4337 (1987).
14. S. Aubry, *Devil's Staircase and Order Without Periodicity in Classical Condensed Matter*, J. de Physique **44**, 147 (1983).
15. P. Bak, *Commensurate Phases, Incommensurate Phases and the Devil's Staircase*, Rep. Progr. Phys. **45**, 587 (1982).
16. E. J. Bergholtz, T. H. Hansson, M. Hermanns, and A. Karlhede, *Microscopic Theory of the Quantum Hall Hierarchy*, Phys. Rev. Lett. **99**, 256803 (2007).
17. E. J. Bergholtz and A. Karlhede, *Quantum Hall System in Tao-Thouless limit*, Phys. Rev. B **77**, 155308 (2008).
18. D. Lundholm, *Many-Anyon Trial States*, Phys. Rev. A **96**, 012116 (2017).
19. M. Planat and C. Eckert, *On the Frequency and Amplitude Spectrum and the Fluctuations at the Output of a Communication Receiver*, IEEE Trans. Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control **47**, 1173 (2000).
20. V. Trifonov, L. Pascualucci, R. Dalla-Favera, and R. Rabadan, *Fractal-like Distributions over the Rational Numbers in Highthroughput Biological and Clinical Data*, Sci. Rep. **1**, 191 (2011).
21. M. Middendorf, E. Ziv, and C. Wiggins, *Inferring Network Mechanisms: The Drosophila Melanogaster Protein Interaction Network*, PNAS **102**, 3192 (2005).
22. A. Altland, D. Bagrets, and A. Kamenev, *Topology versus Anderson Localization: Nonperturbative Solutions in One Dimension*, Phys. Rev. B **91**, 085429 (2015).
23. A. M. Pruisken, *On Localization in the Theory of the Quantized Hall Effect: A Twodimensional Realization of the  $\theta$ -Vacuum*, Nucl. Phys. B **235**, 277 (1984).
24. H. Levine, S. Libby, and A. Pruisken, *Theory of the Quantum Hall Effect (i)-(iii)*, Nucl. Phys. B **240**, 30 (1984).
25. C. Montonen and D. Olive, *Magnetic Monopoles as Gauge Particles?*, Phys. Lett. B **72**, 117 (1977).
26. J. L. Cardy and E. Rabinovici, *Phase Structure of ZP Models in the Presence of a  $\theta$ -Parameter*, Nucl. Phys. B **205**, 1 (1982).

27. K. Bulycheva and A. Gorsky, *Limit Cycles in Renormalization Group Dynamics*, Physics Uspekhi **57**, 171 (2014).
28. O. R. Musin and A. S. Tarasov, *The Tammes problem for  $n = 14$* , Experimental Mathematics **24**, 460 (2015).
29. E. L. Altschuler, T. J. Williams, E. R. Ratner, R. Tipton, R. Stong, F. Dowla, and F. Wooten, *Possible Global Minimum Lattice Configurations for Thomson's Problem of Charges on a Sphere*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2681 (1997).
30. A. Abrikosov, *The Magnetic Properties of Superconducting Alloys*, J. Phys. Chem. Solids **2**, 199 (1957).
31. R. Rammal, G. Toulouse, and M. A. Virasoro, *Ultrametricity for Physicists*, Rev. Mod. Phys. **58**, 765 (1986).
32. C. O'Sullivan, *Formulas for Nonholomorphic Eisenstein Series and for the Riemann Zeta Function at Odd Integers*, Research in Number Theory **4**, 36 (2018).
33. P. Ribeiro and S. Yakubovich, *On the Epstein Zeta Function and the Zeros of a Class of Dirichlet Series* (2022), arXiv:2112.10561 [math.NT]
34. C. L. Siegel and S. Raghavan, *Lectures on Advanced Analytic Number Theory*, Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai, India (1961).
35. Y. Motohashi, *A New Proof of the Limit Formula of Kronecker*, Proc. Japan Academy **44**, 614 (1968).
36. T. M. Apostol, *Modular Functions and Dirichlet Series in Number Theory. Chapter 3*, **41**, Springer-Verlag (1990).
37. D. B. Kaplan, J.-W. Lee, D. T. Son, and M. A. Stephanov, *Conformality Lost*, Phys. Rev. D **80**, 125005 (2009).
38. C. A. Lutken and G. G. Ross, *Implications of Experimental Probes of the RG-Flow in Quantum Hall Systems* (2009), arXiv:0906.5551 [cond-mat.other]
39. D. Carpentier, *Renormalization of Modular Invariant Coulomb Gas and Sine-Gordon Theories, and the Quantum Hall Flow Diagram*, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 3865 (1999).
40. K. Fischer, *Kosterlitz-Thouless Transition in Layered High-Tc Superconductors*, Physica C: Superconductivity **210**, 179 (1993).
41. A. Flack, A. Gorsky, and S. Nechaev, *Generalized Devil's Staircase and RG Flows*, Nucl. Phys. B **996**, 116376 (2023).
42. Cristiano Nisoli, Nathaniel M. Gabor, Paul E. Lammert, J. D. Maynard, and Vincent H. Crespi, *Annealing a Magnetic Cactus into Phyllotaxis*, Phys. Rev. E **81**, 046107 (2010).
43. B. Balagurov and V. Vaks, *Random Walks of a Particle on Lattices with Traps*, Sov. Phys. JETP **38**, 968 (1974).
44. M. Donsker, S. Varadhan, *Large Deviations for Stationary Gaussian Processes*, Comm. Math. Phys. **97**, 187 (1985).

## К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ras.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: [jetp@kapitza.ras.ru](mailto: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](mailto:JETP@kapitza.ras.ru);

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала ([www.jetp.ac.ru](http://www.jetp.ac.ru));

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате  $\LaTeX$  или Word, рисунки — в формате EncapsulatedPostScript (\*.eps), каждый рисунок отдельным файлом. В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате pdf.

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 Всесоюз. 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. СМИРНОВ*

**Редколлегия:**

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,  
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,  
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),  
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ  
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ акад. М. В. САДОВСКИЙ,  
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),  
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),

**Редакционный совет:**

член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова  
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова