



ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ *и* ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 163, ВЫПУСК 2

ФЕВРАЛЬ 2023

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Коррекция волнового фронта для наблюдения экзопланеты на фоне дифракционной окрестности звезды Юдаев А. В., Шашкова И. А., Киселев А. В., Комарова А. А., Тавров А. В. 131
- Спектральные особенности фотоэлектрического эффекта в смесевой донорно-акцепторной композиции фталоцианина цинка и фуллерена $ZnPc:C_{70}$ Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Палто С. П. 153
- Форма спектра и световой сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей в ячейках с анти-релаксационным покрытием стенок в моделях зеркального и диффузного отражения Баранцев К. А., Волошин Г. В., Курапцев А. С., Литвинов А. Н., Соколов И. М. 162

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Коллективные и квазилокальные моды в оптических спектрах гексаборидов Yb_6 и YbB_6 с ян-теллеровской структурной неустойчивостью Случанко Н. Е., Жукова Е. С., Алябьева Л. Н., Горшунов Б. П., Муратов А. В., Алещенко Ю. А., Азаревич А. Н., Анисимов М. А., Шицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б. 172

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

- Исследование контактов Джозефсона $Pb_{0.6}In_{0.4}/KFe_2As_2$ и KFe_2As_2/KFe_2As_2 . Проверка симметрии параметра порядка Голубков М. В., Степанов В. А., Садаков А. В., Усольцев А. С., Морозов И. В. 180
- Об устойчивости аксиально-симметричных состояний в теории Гинзбурга–Ландау Подоляк Е. Р. 189

Образование, диффузия и рост газонаполненных пузырьков в γ -уране при избытке междоузельных атомов: связь молекулярной динамики и кинетики	
..... Лобашев Е. А., Антропов А. С., Стегайлов В. В.	201
Взаимодействие комплексов одноионных магнитов $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})] \cdot 4\text{CHCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ с ферромагнитными микрочастицами Коплак О. В., Дворецкая Е. В., Куницына Е. И., Моргунов Р. Б.	214

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

К задаче о связанном состоянии электрона и дырки в дихалькогенидах переходных металлов	
..... Крачков П. А., Терехов И. С.	227
Жидкость Латтинжера с притяжением и одной примесью: точное решение Афонин В. В.	238

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Квазиизэнтропическое сжатие газообразных гелия и дейтерия в сферических конструкциях при терапаскальных давлениях	Жерноклетов М. В.,
Маначкин С. Ф., Давыдов Н. Б., Раевский В. А., Бликов А. О., Панов К. Н., Рыжков А. В., Аригин В. А., Ткаченко Б. И., Логвинов А. И., Дегтярев А. В., Комраков В. А., Давыдов А. И., Анашкин Н. Н., Хрусталева В. В.	260
Ударно-волновое сжатие азотного флюида в диапазоне давлений 140–250 ГПа	Жерноклетов М. В.,
Ковалев А. Е., Новиков М. Г., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Шутов А. В.	274
Эволюция отрицательной короны в режиме ограничения тока разряда: переход от импульсно-периодического режима к стационарному горению	Козырев А. В., Коконин А. О., Кожевников В. Ю., Тарасенко В. Ф., Бакшт Е. Х., Виноградов Н. П.
	284

КОРРЕКЦИЯ ВОЛНОВОГО ФРОНТА ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ЭКЗОПЛАНЕТЫ НА ФОНЕ ДИФРАКЦИОННОЙ ОКРЕСТНОСТИ ЗВЕЗДЫ

А. В. Юдаев^{a*}, И. А. Шашкова^a, А. В. Киселев^a, А. А. Комарова^{a,b}, А. В. Тавров^a

^a Институт космических исследований Российской академии наук
117997, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 19 мая 2022 г.,
после переработки 21 августа 2022 г.
Принята к публикации 26 августа 2022 г.

Предложен и исследован метод прецизионной коррекции волнового фронта для осуществления астрономического наблюдения экзопланет в дифракционной окрестности звезды. Показана применимость метода для измерения и коррекции волнового фронта в схеме телескопа и интерференционного коронографа без применения гартмановских измерителей волнового фронта. В лабораторном эксперименте получены точность коррекции $\sim \lambda/50$ и коронографический контраст лучше чем 10^5 . Намечены перспективы для увеличения точности коррекции до целевого значения $\lambda/500$ для визуализации Земли в окрестности Солнца, наблюдаемых с расстояния 10 пк (в ближайшей окрестности Солнечной системы), за счет дополнительной коррекции амплитуды и учета аббераций необщего пути.

DOI: 10.31857/S0044451023020013

EDN: OPNCZA

1. ВВЕДЕНИЕ

В астрономическом изображении для наблюдения экзопланеты (земного типа) в дифракционной окрестности звезды (солнечного типа) в видимом диапазоне длин волн развиваются методы улучшения контраста. Сигнал планеты, имеющий интенсивность 10^{-9} – 10^{-10} от максимума функции рассеяния точки (ФРТ) родительской звезды, требуется зарегистрировать на фоне рассеянного света звезды [1–4]. Методы, позволяющие зарегистрировать такой сигнал, называют высококонтрастными или коронографическими, поскольку для регистрации слабого сигнала уменьшают фон более интенсивного сигнала. Применение методики улучшения контраста планеты на фоне звезды обусловлено ограниченным динамическим диапазоном CCD-детектора $\sim 10^4$.

Астрономическое изображение формируется оптикой телескопа, для которой характерны дифракционные эффекты и эффекты рассеяния. Дифракционный и рассеянный компоненты изображения звезды создают фон, превышающий сигнал планеты по уровню, выходящему за границы динамического диапазона фотоприемника ($\sim 10^4$). Поэтому детектирование слабого сигнала экзопланеты на этом фоне затруднено и требует специальных мер. Дифракционный компонент изображения звезды от границ круглой апертуры телескопа ослабляют звездным коронографом [5] с использованием специальных масок: фокальной маски и маски Лию, а также экранированием спайдера, границ сегментов главного и вторичного зеркал телескопа и т. п. После ослабления главного максимума дифракционного изображения звезды (ФРТ) коронографом рассеянный компонент изображения физически и визуально приобретает структуру (совершенного) спекл-поля, которое содержит фазовую и амплитудную модуляции в полных диапазонах фазы ($0 \dots 2\pi$) и (нормированной) интенсивности ($0 \dots 1$). В астрономическом изображении эти эффекты маскируют слабый компонент изображения экзопланеты (ФРТ

* E-mail: yudaev@phystech.edu

планеты). Этот процесс схематично проиллюстрирован на рис. 1.

В верхней части рисунка, иллюстративно, двумерное распределение электрического поля излучения звезды в плоскости (u, v) зрачка оптической системы телескопа схематически показано преобразованным из декартовых координат в координаты на сфере. Радиус сферы соответствует величине среднеквадратичной ошибки волнового фронта. Сфера помещена в фазовую плоскость вдоль действительной Re и мнимой Im осей. Предположим, что среднеквадратичная ошибка фазы рассеянного света составляет примерно $\sigma = 15^\circ \approx \pi/10$ рад, тогда доля нерассеянного света — около 90%. Как известно, число Штреля S характеризует энергию главного максимума ФРТ по отношению к энергии всей ФРТ. S пропорционально квадрату среднеквадратичной ошибки волнового фронта (ВФ) σ в зрачковой плоскости (в зрачке) оптической системы (ОС):

$$S \approx e^{-\sigma^2}. \quad (1)$$

После того как коронограф, размещенный в промежуточной плоскости (u', v') , ослабит нерассеянный компонент излучения звезды наилучшим образом, фазовая ошибка возрастет от значения $\phi(u, v)_{p-v} \cong \pi\sigma$ (индекс «p-v» от англ. peak-to-valley обозначает разность максимального и минимального значений) до максимального значения 2π , амплитудная ошибка также возрастет в полном диапазоне $(0 \dots 1)$ так, что спекл-поле станет из «несовершенного» «совершенным» (partially, fully developed speckle field).

Для целей настоящего анализа следует отметить что «совершенное» спекл-поле от звезды как осевого источника света отличается от электрического поля планеты как неосевого источника (несовершенного спекл-поля) по нескольким характеристикам.

Во-первых, электрическое поле от планеты содержит непогашенную (нерассеянную) часть вдоль действительной оси Re (которая существенно не ослаблена коронографом). Во-вторых, планету наблюдают под углом зрения в направлении, после телескопа отличающемся от направления на звезду более чем на λ/D (λ — длина волны, D — диаметр телескопа), так что пространственные реализации функции рассеяния от планеты и от звезды различаются, и планета формирует другое спекл-поле. Наконец, излучения звезды и планеты являются взаимно некогерентными.

Если оптические излучения от звезды и от планеты проходят через корректирующий фазово-амплитудный экран, реализованный пиксельным

корректируемым элементом адаптивной оптики (АО), установленным до коронографа, то становится возможным в некоторой части изображения $\Omega(u'', v'')$ ослабить компонент звезды и практически не ослабить компонент планеты.

Величина и характеристики ослабления компонентов изображения от звезды и от планеты определяются типом коронографа, но главным образом ошибкой волнового фронта до коронографа. Для ослабления рассеянного компонента используют методы сверхточной АО [3], которые выполняют задачу прецизионной коррекции ВФ с чрезвычайно высокими точностями до $\lambda/10\,000$ по фазе (по величине среднеквадратичного отклонения — rms (root-mean-square)) и до неоднородности 0.1% rms по амплитуде. Номинально, если исправить ВФ до указанных значений, то с помощью коронографа возможно ослабить фон рассеянного компонента звезды на 10^{-9} – 10^{-10} для решения задачи наблюдения Земли и Солнца с межзвездного расстояния.

Указанные точности коррекции фазы и амплитуды трудно достижимы в эксперименте и тем более в инструменте космического телескопа, но многочисленные усилия и публикации [6] демонстрируют развитие и техническую реализуемость этих принципов. Для указанных точностей коррекции ВФ стандартные классические схемы АО, см., например, рис. 2 а, содержащие светоделитель (СД), датчик волнового фронта (ДВФ), активный корректирующий элемент — деформируемое зеркало (ДЗ), алгоритмическую обратную связь между ДВФ и ДЗ, оказываются неприменимы [3]. В частности, это обусловлено наличием так называемых аберраций необщего пути (non-common-path aberrations). Причина аберраций необщего пути — принципиально разные и оптически несопряженные положения плоскостей пиксельного корректора ВФ (исполнительного элемента АО: ДЗ или др.), датчика волнового фронта, например датчика Гартмана, и промежуточных плоскостей элементов оптической системы телескопа, коронографа и др., искажающих коронографическое изображение в канале регистрации иначе, чем в канале ДВФ. Важно, что число элементов оптической системы телескопа с коронографом (точнее, число оптических плоскостей) превышает одну или две плоскости, где практически могут быть установлены корректирующие элементы адаптивной оптики. Без ДВФ в схеме рис. 2 б требуются специальные методики измерения ВФ и управления АО, для учета всего пути распространения ВФ (в телескопе, в сопрягающей оптике и в коронографическом инструменте, последние не показаны на ри-

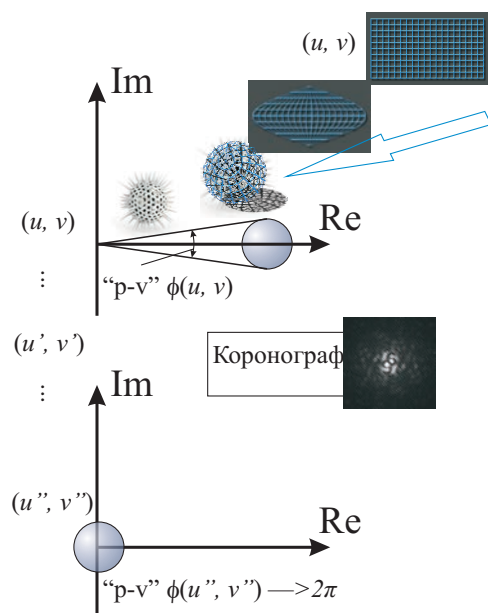


Рис. 1. Эффективное возрастание фазовой ошибки рассеянного компонента излучения звезды при коронаграфическом погашении

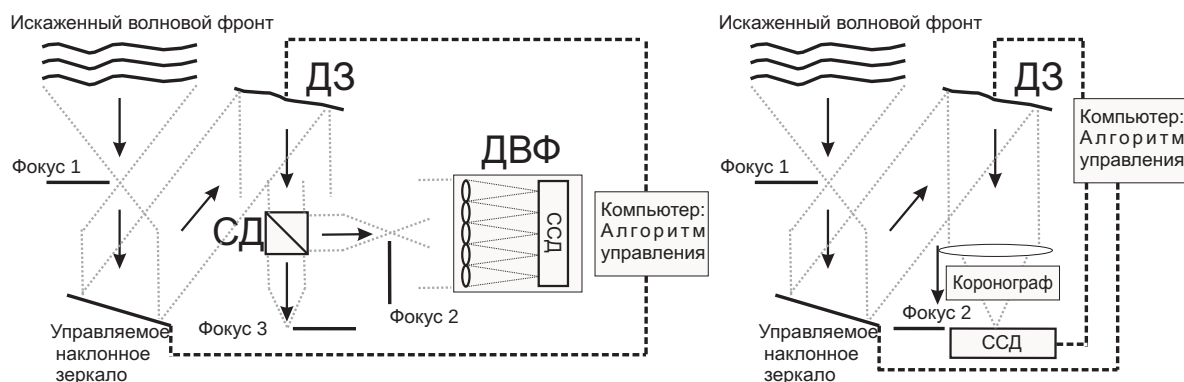


Рис. 2. Схемы коррекции волнового фронта посредством адаптивной оптики (АО). Левая панель (а) — пример построения стандартной схемы АО (с ДВФ). Правая панель (б) — схема АО для коронаграфического высококонтрастного метода (без ДВФ)

сунке).

В дополнение, ограниченные точность и пространственное разрешение ДВФ недостаточны для достижения требуемого качества скорректированного ВФ. Исполнительный элемент адаптивной оптики — (традиционно) деформируемое зеркало, корректирующее ВФ с точностью $\lambda/10\,000$ rms [3], чрезвычайно критичный элемент как по режиму эксплуатации (требуется вакуумирование, термостатирование, стабильность, точное управление и т. п.), так и по его доступности в РФ и его стоимости. На данный момент известно большое число публикаций, посвя-

щенных этой проблематике для коронаграфа космического телескопа НАСА WFIRST (или The Nancy Grace Roman Space Telescope) с диаметром главного зеркала 2.4 м [6], создаваемого НАСА на запасном зеркале телескопа им. Хаббла (HST).

Для одновременной коррекции фазовых и амплитудных aberrаций известны схемы с двумя ДЗ. Первое ДЗ корректирует фазу ВФ, а второе ДЗ, установленное на некотором расстоянии от первого (около метра), эффективно корректирует амплитуду ВФ, так как оптическое преобразование Френеля переводит фазовую модуляцию в фазово-

амплитудную.

Недавно был рассмотрен коронограф в составе отечественного проекта орбитальной обсерватории космического телескопа Спектр-УФ [7]. Предложенные характеристики коронографа без АО в составе обсерватории «Спектр-УФ» ограничивали разрешение и контраст на уровне, близком к уже достигнутому наземными обсерваториями, оснащенными системами с АО. Сейчас очевидна необходимость использования прецизионной коррекции ВФ, для того чтобы пространственное разрешение и контраст стали значительно лучше и имели бы характеристики, необходимые для наблюдения землеподобных экзопланет.

Сегодня наиболее распространенная схема звездного коронографа — различные модификации коронографа Лию и аподизационные схемы. Обобщенно они относятся к масочным коронографам, так как принципиально схемы содержат различные маски в фокальной и зрачковой плоскостях [5]. Модификации масок обеспечивают различные свойства коронографа. Оптика масочного коронографа содержит несколько линз или зеркал для построения сопряженных фокальной и зрачковой плоскостей, где размещены маски, и CCD-камеры поля, спектрографы и дополнительные анализаторы. Маска в плоскости, оптически сопряженной со зрачком телескопа, имеет историческое название маски Лию — это простейший вариант аподизации, более сложные варианты которой имеют функциональные преимущества наряду со сложностью их реализаций.

Альтернатива масочному коронографу, интерференционный коронограф — это интерферометр темного поля для осевого источника света (звезды в нулевом порядке интерференции), но условие темного поля не переносится на неосевой источник (планету, наблюдаемую под некоторым углом, большим чем $0.38 \dots 5\lambda/D$, что зависит от конструкции интерферометра, где D — диаметр телескопа). Интерференционный коронограф менее распространен, чем масочные коронографы, так как он содержит большее число оптических элементов (зеркал и апертур). Более подробное сравнение недостатков и преимуществ интерференционного и масочного коронографов приведено в работе [5]. Основной недостаток — это ограничение коронографического ослабления при конечном (не бесконечно малом) наблюдаемом размере осевого источника. Так, для модельных Солнце–Земля, наблюдаемых с расстояния 10 пк телескопом с апертурой 1 м, максимальный оптический контраст $\sim 10^{-5}$ ($\lambda = 500$ нм). Для преодоления этого ограничения предложены схемы интер-

ферометра темного поля вращательного сдвига на углы, меньшие 180° , например на 10° , который имеет улучшенный контраст [8]. Интерферометр вращательного сдвига реализует наложение (суперпозицию) изображений с поворотом. В качестве преимуществ интерференционного коронографа можно указать, например, ахроматизм, возможность гидирования через светлый порт, технологическую доступность в РФ и некоторые другие преимущества.

Прецизионная коррекция ВФ принципиально и технически связана со схемой коронографа. АО компенсирует аберрации и дефекты, учитывая оптику и апертуры коронографа. Также измерение ВФ происходит после коронографа. Методы АО, разработанные для функционирования в составе масочного коронографа Лию следует доработать для коронографа другого типа. В настоящей работе мы предлагаем и исследуем метод управления АО в составе интерференционного коронографа, включая моделирование и лабораторный эксперимент.

2. ВОЗМОЖНОСТИ ПОГАШЕНИЯ РАСSEЯННОГО ФОНА ЗВЕЗДЫ В ОГРАНИЧЕННОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОБЛАСТИ ИЗОБРАЖЕНИЯ

Визуализация слабого компонента изображения (экзопланеты) в дифракционной окрестности звезды требует высокого контраста; космический телескоп оснащают адаптивной оптикой и коронографом для максимального ослабления фона звезды. Физически фон звезды — это вторичные максимумы, «крылья» ФРТ, которые обусловлены дифракционным компонентом (вследствие эффектов дифракции на апертурах оптики) и компонентом спекл-поля от рассеянного света (вследствие рассеяния на дефектах, микрорельефе и микрошероховатостях оптических поверхностей). С помощью пространственного (фазового) модулятора света (деформируемого зеркала или жидкокристаллического пиксельного модулятора (LC-SLM, (phase-only) liquid crystal spatial light modulator)) спекл-поле возможно ослабить до достижения требуемого коронографического контраста в ограниченной пространственной области Ω плоскости изображения, т. е. провести зональную коррекцию. Ограничение области коррекции происходит вследствие ограниченности числа актуаторов ДЗ или SLM, что по теореме Котельникова определяет размеры корректируемой области Ω . Также на размер Ω влияют величина и характер фазово-амплитудной ошибки ВФ, которую технически возможно скорректировать используе-

мой АО с реализованной точностью и посредством примененных алгоритмов управления АО.

Основываясь на принципах фурье-оптики [9], где пространственные частоты — наклоны ВФ в зрачковой плоскости — соответствуют линейным координатам изображения (в фокальной плоскости), можно сделать вывод, что существует некоторое тривиальное решение зональной коррекции ВФ, когда в волновом фронте достаточно ослабить пространственные частоты, перенаправляя или рассеивая компоненты ВФ с локальными наклонами, соответствующими зоне погашения спекл-шума. Пример такой тривиальной коррекции был показан как в моделировании, так и в эксперименте, см. рис. 3.

На рис. 3 справа четко видны две симметричные прямоугольные области с ослабленным уровнем спекл-шума. Очевидно, что компоненты изображения, соответствующие пространственным частотам в зонах погашения, были перенаправлены или, точнее, рассеяны в направлении других пространственных частот. Об этом свидетельствует, в частности, возросший уровень интенсивности спекл-поля в периферийной области по сравнению с областью на левой половине рисунка, где видна некоторая концентрация энергии вокруг центра (см. цветовую шкалу, характеризующую уровень интенсивности). Справа центральная концентрация энергии спекл-поля отсутствует. Для спекл-поля на рис. 3 был применен стохастический метод оптимизации по генетическому алгоритму [10, 11], по типу алгоритма Монте-Карло для поиска глобального экстремума (алгоритм «отжига», annealing). Стохастические алгоритмы могут быть более устойчивы к помехам, шуму, неустойчивости, неточности измерений и т.п., однако взамен они требуют для реализации большое число итераций и измерений, а также гиперпараметров оптимизируемой функции. При компьютерном моделировании этими недостатками можно пренебречь и использовать их, например, для проверки существования решения и исследования его свойств, в частности, точности коррекции (в зависимости от начальных условий, качества ВФ на входе, ошибок измерения, числа актуаторов и т.п.).

Очевидно, что тривиальное решение неприменимо для решения задачи контрастирования области, где поставлена цель наблюдения экзопланеты, так как ФРТ экзопланеты также может быть ослаблена. Поэтому, для того чтобы исключить ослабление ФРТ планеты, следует корректировать волновой фронт на основании измерения распределения ВФ в зрачковой плоскости. Это распределение следует измерить после коронографа, так как оно

должно содержать искажения ВФ в том числе и в оптике коронографа. Актуаторы ДЗ или пиксели LC-SLM адаптивной оптики должны иметь конфигурацию, противоположную локальной деформации ВФ в плоскости зрачка. Очевидно, что для этого необходимо определить распределение ВФ в плоскости зрачка (до коронографа), причем корректируемый ВФ также должен (с обратным знаком) учитывать aberrации внутри оптики коронографа, которые приобретет ВФ при последующем распространении до плоскости изображения.

Существование такого решения известно [12] для режима малых деформаций ВФ: $\sigma \ll \lambda$. Решение для коррекции ВФ представляет собой матрицу управляющих напряжений, подаваемых на соответствующие актуаторы ДЗ или пиксели SLM. Решение возможно получить итерационным способом с регистрацией некоторого набора изображений на CCD-камере, установленной в плоскости изображения после коронографа.

Если упростить задачу и временно исключить факторы наличия шума и ограниченной точности непосредственно АО, а также исключить так называемые aberrации необщего пути (дополнительные aberrационные экраны в плоскостях Френеля), то возможно точное решение без применения итерационных методов в линейном приближении фурье-оптики, через преобразование Фурье. В реальной ситуации итерационные алгоритмы измеряют все более слабый компонент рассеянного поля (спекл-шума), что требует усреднений и длительных экспозиций, как следствие возрастают требования ко времени настройки и стабильности системы интерференционного инструмента.

При использовании ДЗ число актуаторов составляет матрицу с числом элементов равным или большим $N \times N = 100 \times 100$ пикселей, положение каждого из которых контролируют с шагом $2^8\text{--}2^{16}$ положений в диапазоне порядка длины волны λ . Для целей прецизионной коррекции ВФ (см., например, [12]), в режиме слабых начальных aberrаций $\lambda/1000$ «p-v» (от максимума до минимума) показано, что пиксельный фазовый модулятор (ДЗ, фазовый LC-SLM), размещенный в зрачке ОС может скорректировать спекл-поле в ограниченной области Ω плоскости изображения. Эта область ограничена числом актуаторов N^2 со стороны высоких пространственных частот $(N/2)\lambda/D$. В соответствии с теоремой Котельникова, в оптике преобразование Фурье реализовано так, что единичный пиксель зрачка соответствует угловой частоте и число пикселей N определяет так называемый внешний рабочий угол

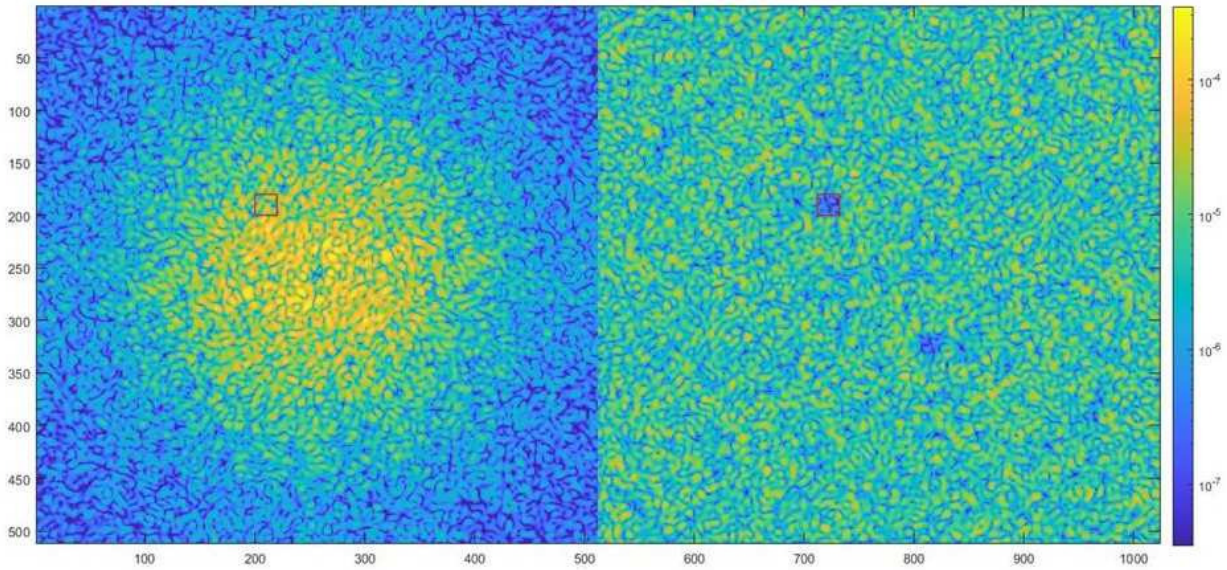


Рис. 3. Результаты моделирования (тривиальной зональной) коррекции волнового фронта, содержащего спекл-поле. Слева — нескорректированное спекл-поле в плоскости изображения после интерференционного коронографа, где красным квадратом показана область коррекции. Справа — ослабленное спекл-поле в зоне коррекции и симметричной области для интерференционного коронографа по схеме интерферометра вращательного сдвига (ИВС 180°), см. [2]

(OWA, outer working angle) вдоль одной из координатных осей.

Центральная область изображения, состоящая главным образом из нулевой и первых пространственных частот, практически не ослабляется, вследствие конструктивных особенностей пиксельной модуляции. У ДЗ модуляция отдельного пикселя (актуатора) связана с положением соседнего актуатора ДЗ и определена функцией отклика (crosstalk). У LC-SLM существует граница пикселя — немодулируемая область между пикселями, размер которой определяет fill factor. (У LC-SLM, используемого в этой работе типа HOLOEYE Pluto VIS640 fill factor = 93%, т.е. граница пикселя — это 7% от размера пикселя.)

В монохроматическом приближении пространственное распределение электрического поля E в зрачковой плоскости (u, v) телескопа имеет вид

$$E(u, v) = P(u, v)e^{i\phi(u, v)}. \quad (2)$$

При малых искажениях фазы и амплитуды P в (2) в зрачке телескопа справедливо следующее линейное приближение для поля в плоскости изображения с координатами (α, β) :

$$\hat{E}(\alpha, \beta) = \hat{P}(\alpha, \beta) + iP\hat{\phi}(\alpha, \beta). \quad (3)$$

где значение $\hat{P} = \hat{P}(0, 0)$ равно максимуму ФРТ звезды, пространственные распределения фазы $\hat{\phi}(\alpha, \beta)$ и амплитуды $\hat{P}(\alpha, \beta)$ являются фурье-преобразованиями $F\{\dots\}$:

$$\hat{\phi}(\alpha, \beta) = F\{\phi(u, v)\}, \quad \hat{P}(\alpha, \beta) = F\{P(u, v)\}.$$

Первое слагаемое в правой части (3) $\hat{P}(\alpha, \beta)$ — это изображение звезды без aberrаций, так называемая дифракционная ФРТ без aberrаций, которую погашает коронограф (без АО). Второе слагаемое $iP\hat{\phi}(\alpha, \beta)$ составляет спекл-поле, состоящее из полностью рассеянного света, что эквивалентно интерференции на микрошероховатости — случайном экране. Спекл-поле имеет хаотичную структуру наложенных друг на друга искаженных ФРТ со случайными aberrациями (см. рис. 2). Поскольку в главном максимуме ФРТ содержится до 95% энергии, спекл-поле имеет средний размер зерна, равный диаметру главного максимума ФРТ $\sim \lambda/D$. Вклад нулевой пространственной частоты в среднюю интенсивность спекл-поля зависит от случайной реализации спектра мощности микро рельефа (эквивалентной микрошероховатости).

Для ослабления фона звезды (спекл-поля) в зоне изображения, ограниченной областью $\Omega(\alpha, \beta)$, ВФ корректируют посредством пространственного фазового модулятора (ДЗ или SLM), состоящего из

$N \times N$ управляемых пикселей (актуаторов). Эта коррекция в первом приближении может быть описана фазовой функцией $\psi(u, v)$:

$$\psi(u, v) = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} \alpha_{kl} f_{kl}(u, v), \quad (4)$$

где

$$f_{kl}(u, v) = f\left(u - \frac{kd}{\lambda}, v - \frac{ld}{\lambda}\right),$$

d — расстояние между пикселями ДЗ или SLM, α_{kl} — значение фазовой модуляции в каждом пикселе с номерами k и l .

Точность модуляции $\delta\psi(u, v)$ определяет степень погашения спекл-поля — контраст фона относительно непогашенного максимума ФРТ $\hat{P}$ составляет приблизительно квадрат точности коррекции $(\delta\psi(u, v))^2$. Например, при точности фазовой модуляции $\delta\psi(u, v) \approx \lambda/100$ (1% от 2π) уровень спекл-шума, характеризующийся начальными aberrациями $(p-v) \sim \lambda/1000$, может быть ослаблен в 10^4 раз (на длине волны λ оптического диапазона). При начальном уровне оптических aberrаций, превышающих $(p-v) \sim \lambda/1000$, приближение (3) оказывается нестрогим, увеличивается нелинейность, которая может быть решена итерационным способом. Одна из важных причин нелинейности — это амплитудная модуляция вследствие aberrаций необщего пути. Фазовые дефекты оптических плоскостей, несопряженных со зрачком, по причине дифракции Френеля вызывают фазово-амплитудные искажения. Также в оптической системе могут быть и изначально амплитудные дефекты.

В линейном режиме конфигурацию актуаторов АО для коррекции ВФ, $\psi(u, v) = -\phi(u, v)$ [12], находят, детектируя изображения в фокальной плоскости и определяя как минимум три интенсивности $\{I_0(\alpha, \beta), I_1(\alpha, \beta), I_2(\alpha, \beta)\}$, соответствующие трем пробным модуляциям волнового фронта $\{\psi_0(u, v), \psi_1(u, v), \psi_2(u, v)\}$. Для коронографа Лио, например, известна методика EFC (electric field conjugation), детали которой можно найти в [13].

Для интерференционного коронографа [14], в частности ИВС 180°, мы используем трехшаговый метод [15] (или метод с большим числом шагов) для определения фазового и амплитудного распределений в плоскости, оптически сопряженной с детектором CCD. В результате определяют искомое распределение электрического поля:

$$P(u, v), \phi(u, v). \quad (5)$$

Похожие алгоритмы продолжают совершенствоваться, стимулируемые главным образом планами

НАСА по созданию космического телескопа Ø2.4 м [6] с коронографом WFIRST-CGI для наблюдения экзопланет, в перспективе землеподобных планет в так называемой зоне обитаемости. Разработаны алгоритмические методы также с двумя адаптивными зеркалами (ДЗ) в несопряженных плоскостях для фазовой коррекции амплитудной модуляции [16]. Точность измерения фазы $\psi(u, v)$ ограничена точностью измерения слабого сигнала, нелинейностью задачи при наличии дополнительных оптических элементов в промежуточных плоскостях, искажающих ВФ, френелевских экранов, составляющих aberrации необщего пути. В схеме телескопа при астрономических наблюдениях ограничение точности вызвано нестабильностью гидирования при визировании на родительскую звезду.

Фазовая коррекция ВФ в коронографе использует измерение фазового экрана $\psi(u, v) = -\phi'(u, v)$, такого, что с обратным знаком минимизирует интенсивность ФРТ звезды. Упрощенно, без дополнительных aberrаций, под распределением фазы $-\phi'(u, v)$ понимают ВФ, который может быть рассчитан обратным фурье-преобразованием электрического поля из плоскости изображения в плоскость зрачка:

$$P'(u, v)^{i\phi'(u, v)} = F^{-1}\{\hat{P}(\alpha, \beta)^{i\hat{\phi}(\alpha, \beta)}\}. \quad (6)$$

В реальности в промежуточных плоскостях $\{u', v'\}$, $\{u'', v''\}$, ... между зрачковой плоскостью $\{u, v\}$ и плоскостью изображения $\{\alpha, \beta\}$ находятся фазово-амплитудные экраны: апертуры и оптические элементы с aberrациями. Оптическое преобразование будет описываться комбинацией прямых и обратных (нелинейных) математических преобразований Френеля и (линейного) прямого преобразования Фурье, так что преобразование (6) выражается нелинейным оператором $\mathbf{C}$. Преобразование $\mathbf{C}$ содержит линейную часть $\mathbf{F}$ фурье-преобразования и нелинейную часть Δ , которая по порядку величины варьируется в зависимости от глубины модуляции фазово-амплитудными экранами в плоскостях $\{u', v'\}$, $\{u'', v''\}$, ...:

$$\begin{aligned} P'(u, v)^{i\phi'(u, v)} &= \mathbf{C}\{\hat{P}(\alpha, \beta)^{i\hat{\phi}(\alpha, \beta)}\} = \\ &= \mathbf{F}^{-1}\{\hat{P}(\alpha, \beta)^{i\hat{\phi}(\alpha, \beta)}\} + \Delta\{\hat{P}(\alpha, \beta)^{i\hat{\phi}(\alpha, \beta)}\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Для интерференционного коронографа мы предлагаем и исследуем методику измерения амплитудного и фазового распределений электрического поля в плоскости зрачка, принципиально отличающуюся от (7) и заключающуюся в регистрации нескольких изображений (интенсивностей) в плоскости, сопря-

женной со зрачком, полученных при наборе контролируемых фазовых сдвигов.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗОВОГО И АМПЛИТУДНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЙ В ЗРАЧКОВОЙ ПЛОСКОСТИ С ПОМОЩЬЮ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ N ФАЗОВЫХ СДВИГОВ

Рассмотрим применение интерференционного коронографа со схемой интерферометра вращательного сдвига с поворотом на 180° [2, 14] в задаче измерения волнового фронта. В ИВС 180° возможна последовательная пошаговая фазовая модуляция половины поля в сопряженной зрачковой плоскости, где установлен пиксельный элемент АО (LC-SLM) для измерения распределений фазы $\phi(u, v)$ и амплитуды $P(u, v)$.

В интерферометрии широко известны (см., например, [16]) шаговые методы измерения распределения фазы (PSI, phase-shifting interferometry). Так, например, в одном плече интерферометра Майкельсона положение референтного зеркала фиксировано, а в другом плече интерферометра зеркало циклически смещают вдоль оптического пути на кратную величину фазового сдвига α и при этом измеряют соответствующие распределения интенсивности $I_i(u, v)$. Известны [16] трех-, четырех- и многошаговые методы.

Простейший трехшаговый PSI-метод предполагает постоянный «шаг» модуляции фазы: $-\alpha$, 0 , α . При $\alpha = \pi/2$, измерив три последовательных значения интенсивности $I(u, v)_{\alpha=-\pi/2} = I_1$, $I(u, v)_{\alpha=0} = I_2$ и $I(u, v)_{\alpha=\pi/2} = I_3$, можно вычислить распределение фазы

$$\phi(u, v) = \text{tg}^{-1}\left(\frac{I_1 - I_3}{2I_2 - I_1 - I_3}\right) \quad (8)$$

и модуль функции когерентности (взаимную амплитуду интерферирующих волн)

$$\gamma(u, v) = \frac{\sqrt{(I_1 - I_3)^2 + (2I_2 - I_1 - I_3)^2}}{I_1 + I_3}. \quad (9)$$

Известно [15], что трехшаговый алгоритм (8), (9) имеет наибольшую погрешность к ошибкам измерения интенсивностей $I_{1...3}$. Более точным является, например, четырехшаговый метод с тем же шагом $\alpha = \pi/2$, когда измеряют четыре распределения интенсивности $I_{1...4}$ соответственно с фазовыми сдвигами $-\pi/2, 0, \pi/2, \pi$. Реализация трехшагового метода в ИВС 180° показана на рис. 4. Здесь алгоритм

четырёхшагового метода дополнен синей пунктирной линией.

При малых искажениях волнового фронта измерение интенсивности I_4 при $\alpha = 0$ затруднено, так как это режим темного поля, однако при больших искажениях волнового фронта $\sim \lambda$ условие темного поля не выполняется, так что четырехшаговый режим становится более надежным. Для четырехшагового метода

$$\phi(u, v) = \text{tg}^{-1}\left(\frac{I_4 - I_2}{I_1 - I_3}\right), \quad (10)$$

$$\gamma(u, v) = 2 \frac{\sqrt{(I_4 - I_2)^2 + (I_1 - I_3)^2}}{I_1 + I_2 + I_3 + I_4}. \quad (11)$$

Рассмотрим волновой фронт, который имеет пространственное распределение фазы $\phi'(u, v)$. Интерференционный коронограф со схемой ИВС 180° сравнивает электрические поля E из центрально-симметричных зон, добавляя фазовый сдвиг π , так что интенсивность $I(u, v) \rightarrow 0$ при равенстве модулей амплитуд $|E(u, v)| = |E(-u, -v)|$, ($P(u, v) = P(-u, -v)$) и фаз $\phi(u, v) = \phi(-u, -v)$ записывается как

$$I = \langle E(u, v) \dot{E}(-u, -v) \rangle, \quad (12a)$$

$$I = |E(u, v)|^2 + |E(-u, -v)|^2 + 2|E(u, v)||E(-u, -v)| \times \cos(\phi(u, v) - \phi(-u, -v) \pm \pi), \quad (12b)$$

где оператор $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю, а $\dot{E}$ обозначает комплексное сопряжение.

Измеренное таким образом (см. (8) или (10)) распределение $\phi(u, v)$ разности фаз двух полуплоскостей зрачка достаточно отобразить в одной полуплоскости зрачка посредством АО как $-\phi'(u, v)$. Тогда в случае только фазовых искажений (и в отсутствие aberrаций необщего пути) слабый компонент изображения от неосевого источника экзопланеты будет проявлен или контрастирован на погашенном фоне звезды (осевого источника). Поскольку фотоприемная CCD-камера для регистрации L последовательных изображений $I_{1...L}$ пошагового PSI-метода установлена в оптически сопряженной зрачковой плоскости после интерференционного коронографа, учитывается суммарный вклад в фазовое распределение всех значимых оптических поверхностей, в том числе и вклад aberrаций необщего пути внутри оптической схемы коронографа.

Дополнительно к фазе $\phi(u, v)$, в зрачковой плоскости присутствуют еще и амплитудные искажения

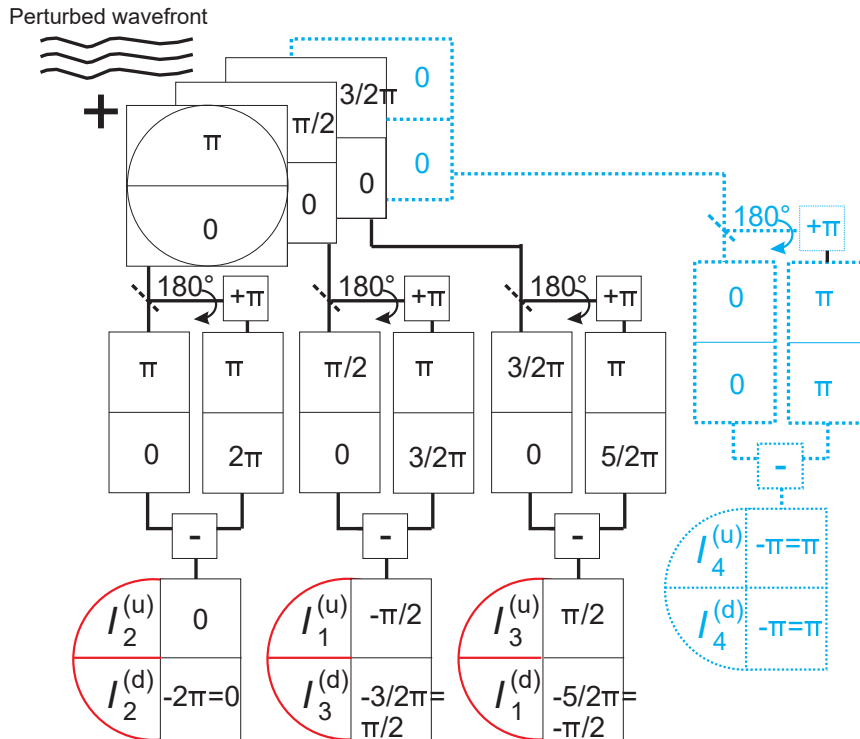


Рис. 4. Схема фазовой модуляции в зрачковой плоскости и соответствующие трехшаговому алгоритму (8), (9) значения интенсивностей $I_{1...3}^{(u)}$, $I_{1...3}^{(d)}$ для верхней (u) и нижней (d) половин поля вторичного зрачка. Синим цветом дополнены модуляция и интенсивности $I_4^{(u)}$, $I_4^{(d)}$ для четырехшагового алгоритма (10), (11)

$P(u, v)$. Применяя LC-SLM как АО, можно использовать внешние настройки поляризации для осуществления фазово-амплитудной модуляции.

Рисунок 4 иллюстрирует трех- и четырехшаговые методы модуляции на полуплоскостях зрачковой плоскости. При интерференции использована фазовая модуляция половины поля, согласно с алгоритмами (8)–(11).

Здесь волновой фронт, имеющий некоторое фазовое распределение $\phi(u, v)$, получает дополнительный фазовый сдвиг α половины поля (в зрачковой плоскости). Распространение волн в плечах интерферометра приводит к повороту изображения на 180° и дополнительный сдвиг фаз на π радиан, что схематично показано на рис. 4. Внизу обозначены соответствующие разности фаз на полуполях (с условными индексами «d» — нижнее и «u» — верхнее полуполя соответственно), слева — соответствующие значения интенсивностей, регистрируемые трех- (и четырех-) шаговым методом в обозначениях $I_{1...3,4}$. Реализация четырехшагового метода (10), (11) показана пунктиром синего цвета справа.

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕРЕНИЯ И КОРРЕКЦИИ ВФ В ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЕ С ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫМ КОРОНОГРАФОМ

4.1. Принципиальная оптическая схема для расчета коронографических изображений в присутствии и компенсации искажений ВФ

Для проверки применимости пошагового PSI-метода в случае интерференционного коронографа ИВС 180° было проведено численное моделирование. Мы дополнили пакет программ Proper [17], используемый в проекте НАСА WFIRST [6] блоками: PSI — шагового метода определения фазы и амплитуды, интерференционного коронографа (ИВС 180°) и другими вспомогательными опциями. Была смоделирована оптическая схема, показанная на рис. 5, содержащая телескоп (показан линзой L_1), оптические элементы (линзы $L_2 \dots L_6$) для формирования оптических зрачковых плоскостей $\Sigma' = (u', v')$, $\Sigma'' = (u'', v'')$ и $\Sigma''' = (u''', v''')$, сопряженных с первичным зрачком $\Sigma_0 = (u, v)$. В зрачке Σ_0 смоделированы aberrации телескопа, во вторичном зрачке Σ' установлен корректирующий фазовый элемент АО: пиксельный корректор

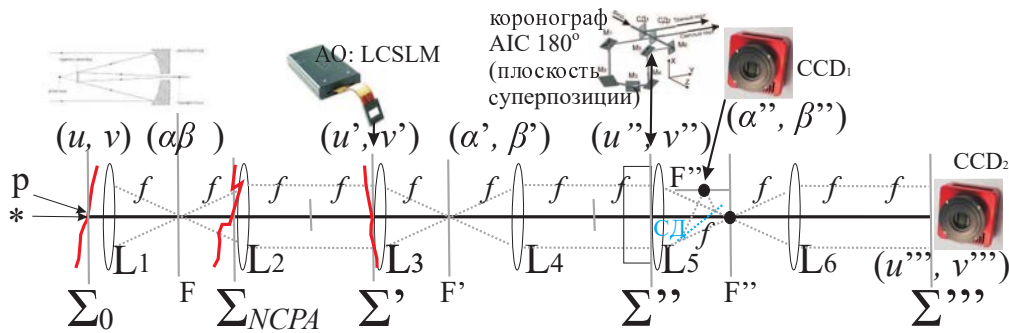


Рис. 5. Принципиальная оптическая схема коррекции ВФ, содержащая телескоп, корректор ВФ (АО), интерференционный коронаграф, CCD-камеры для регистрации изображений в фокусе и в зрачке

ВФ (LC-SLM). В следующем оптически сопряженном зрачке Σ'' помещен интерференционный коронаграф, так что плоскость $\Sigma'' = (u'', v'')$ соответствует сложению ВФ. В зрачке Σ''' установлена CCD₂ для анализа ВФ путем регистрации серии PSI-изображений $I_{1...L}$ для реализации шагового метода для измерения распределений фазы $\phi(u, v)$ и взаимной амплитуды $\gamma(u, v)$. В схеме перед фокусом F'' показан (синей пунктирной линией) переключаемый или стационарный светоделитель СД для установки CCD-камеры поля (CCD₁). При моделировании учтены aberrации необщего пути NCPA (non-common path aberrations), привнесенные в плоскость Σ_{NCPA} , оптически несопряженную со зрачком. Таких взаимно несопряженных плоскостей ($\Sigma_{NCPA}^1, \dots$ не показаны на рисунке) может быть несколько, что учитывает микрорельеф, микрошероховатости и дефекты оптических элементов.

С целью упрощения анализа влияния aberrаций, коррекции ВФ на коронаграфическое изображение, на рис. 5 показана принципиальная оптическая система с единичным увеличением, с равными фокусными расстояниями f оптических элементов. На практике увеличения и масштабы изображений отличаются от моделируемых параметров. Также практическая схема упрощена.

4.2. Примеры aberrационных экранов в различных плоскостях оптической схемы и возможность фазовой коррекции ВФ

На рис. 6 приведены некоторые результаты моделирования схемы рис. 5. Примеры некоррелированных aberrационных экранов в плоскостях Σ_0 и в Σ_{NCPA} показаны соответственно на рис. 6 а и б. Среднеквадратичная ошибка ВФ Σ_0 $\sigma = 10$ нм, а ВФ Σ_{NCPA} $\sigma = 1$ нм. В модели ВФ Σ_0 на главном зеркале телескопа учитывали два типа геометриче-

ских и статистических aberrаций. Геометрические aberrации соответствовали классическим низкочастотным aberrациям: дефокусировке, сферической aberrации, коме, астигматизму, дисторсии и т. д., для которых полиномы Цернике до 10 порядка имеют выраженную сходимость. Статистические aberrации характеризуются спектром мощности ошибок в области средних и высоких пространственных частот f , убывающих по закону f^{-2} . Среднеквадратичную ошибку ВФ (СКО — среднее квадратичное отклонение) $\sigma = 10$ нм вычисляли на характеристической длине $0.05D$.

Звезду (*) и планету (p) размещали на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ и моделировали с различными интенсивностями, соответственно I_* и I_p , так что контрасты C между ними имели значения $C = I_{*,@ \lambda}/I_{p,@ \lambda} \approx 10^6$ и 10^9 . Здесь $I_{*,@ \lambda}/I_{p,@ \lambda}$ — отношение световых потоков в максимумах ФРТ звезды и планеты на фиксированной длине волны $\lambda = 500$ нм. На рис. 6 в-к показаны коронаграфические изображения с учетом волновых фронтов: Σ_0 и $\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA}$ без компенсации фазы в плоскости $\Sigma' = (u', v')$ (рис. 6 в-е), и с компенсацией фазы (рис. 6 ж-к). Если присутствует только aberrация ВФ в зрачке $\Sigma_0 = (u, v)$, то компенсация фазы в сопряженном зрачке $\Sigma' = (u', v')$ приводит к чистому (без спекл-поля) изображению планеты и ее симметричной копии (рис. 6 ж, з). Если присутствуют обе aberrации, как в зрачке Σ_0 , так и в промежуточной (не в зрачковой) плоскости Σ_{NCPA} , то не удастся только фазовой модуляцией получить чистое изображение планеты. Фазовые aberrации необщего пути Σ_{NCPA} обуславливают фазово-амплитудное распределение поля в плоскости зрачка (рис. 6 и, к). Этот эффект визуально заметен при существенно больших контрастах между звездой и планетой $C = 10^9$ и практически незаметен при малых контрастах $C = 10^4$, ср. рис. 6 и и к. В частности,

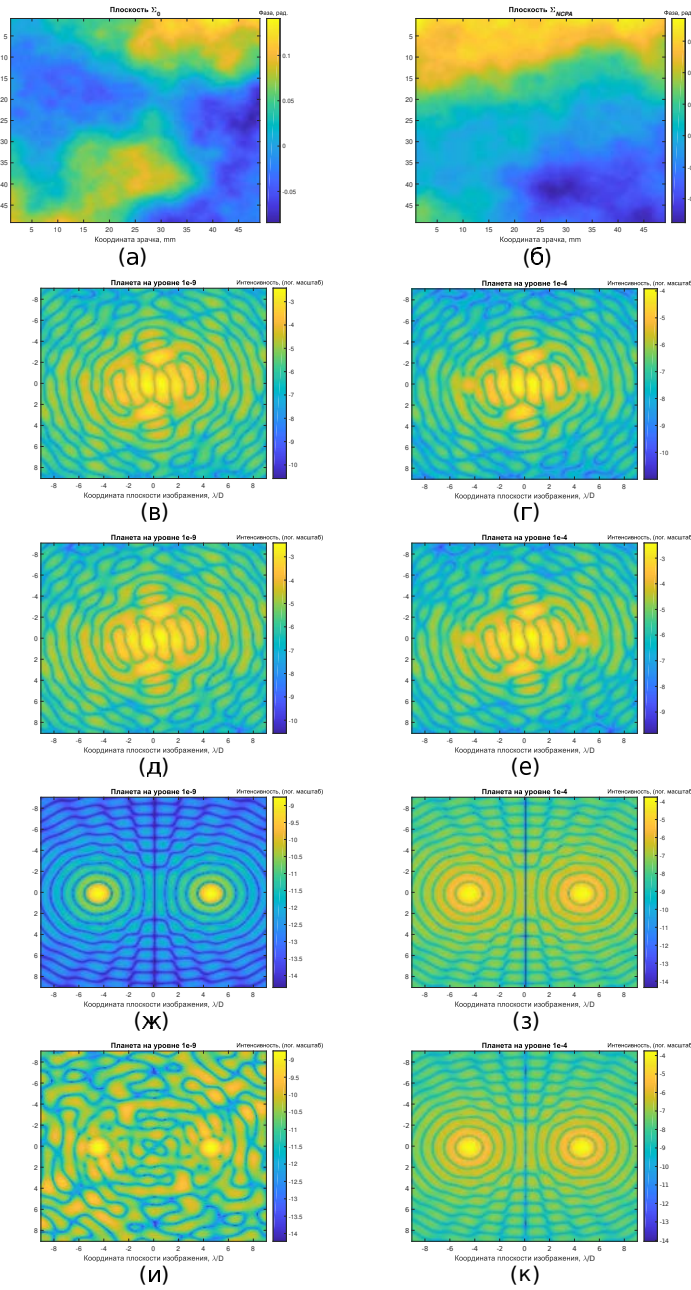


Рис. 6. Абберационные экраны и соответствующие коронографические изображения, использованные и вычисленные согласно схеме рис. 5. Абберационные экраны (фазовые распределения $\phi(u, v)$ в Σ_0 и в Σ_{NCPA}): а) Σ_0 ($\sigma = 10$ нм) и б) Σ_{NCPA} ($\sigma = 1$ нм). Коронографические изображения $I(\alpha'', \beta'')$ в фокусе F'' на камере поля CCD₁, вычисленные с учетом искажения ВФ Σ_0 с разными начальными контрастами планеты и звезды C^{-1} : в) 10^{-9} и г) 10^{-4} ; вычисленные с учетом искажений ВФ Σ_0 и Σ_{NCPA} с контрастами планеты и звезды C^{-1} : д) 10^{-9} и е) 10^{-4} . Коронографические изображения $I(\alpha'', \beta'')$, вычисленные с учетом коррекции ВФ Σ_0 посредством АО, постановкой фазового экрана $-\phi(u', v')$ в плоскости $\Sigma'(u', v')$ для начальных контрастов планеты и звезды C^{-1} : ж) 10^{-9} и з) 10^{-4} . Коронографические изображения $I(\alpha'', \beta'')$ при коррекции ВФ $\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA}$ постановкой фазового экрана $-\phi_1(u', v') \neq \phi(u', v')$ (учитывающего суммарный эффект $\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA}$ в плоскости $\Sigma'(u', v')$) для C^{-1} : и) 10^{-9} и к) 10^{-4} .

если смоделировать дополнительную компенсацию интенсивности в зрачке $\Sigma' = (u', v')$, то коронографическое изображение будет иметь вид чистого, без спекл-поля, распределения интенсивности аналогично рис. 6 *ж* и *з*.

Следует отметить два важных аспекта: во-первых, моделирование на рис. 6 было проведено с известными распределениями фазы $\phi(u', v')$ и амплитуды $P(u', v')$ в плоскости, где была коррекция ВФ $\Sigma' = (u', v')$ — что возможно при моделировании, а на практике требуется измерение этих распределений. Во-вторых, компенсация фазы повторяла точное решение без учета шума, неточностей модуляции, достаточного числа пикселей и т. п. Ниже мы учитываем эти замечания.

4.3. Определение фазового экрана для коррекции волнового фронта шаговым методом модуляции фазы (PSI)

В этом численном эксперименте показано (см. рис. 7), что четырехшаговый метод модуляции фазы, примененный на половине зрачковой плоскости (см. рис. 4 и разд. 3) успешно определяет требуемые для осуществления коррекции ВФ пространственные распределения фазы $\phi(u', v')$ и амплитуды $P(u', v') \sim \gamma(u', v')$ в плоскости Σ' . Рисунок 7 иллюстрирует методику измерения ВФ после коронографа и демонстрирует коррекцию ВФ при использовании измеренных таким образом $\phi(u', v')$ и $P(u', v')$. Так, на рис. 7 *а, в, д, ж* показаны четыре фазовых экрана в плоскости Σ' для каждого шага модуляции $\alpha = -\pi/2, 0, \pi/2, \pi$ соответственно. Соответственно им, справа на рис. 7 *б, г, е, з* показаны распределения фаз в сопряженной зрачковой плоскости $\Sigma''' = (u''', v''')$. Далее вычисляют распределение фазы $\phi(u', v')$, которое при передаче на пиксели АО LC-SLM с обратным знаком $-\phi(u', v')$ корректирует ВФ.

На рис. 7 *и–л* показаны коронографические изображения для начального контраста $C = 10^9$, когда поданы aberrации Σ_0 или $(\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA})$, определен и подан корректирующий фазовый компонент $-\phi(u', v')$. Так, при вычислении изображения на рис. 7 *и* учтены aberrации в зрачке Σ_0 (рис. 6 *а*) и использован соответствующий корректирующий экран — как результат наблюдаем чистое коронографическое изображение без спекл-шума. На рис. 7 *к* активны aberrации в зрачке Σ_0 и в несопряженной плоскости Σ_{NCPA} , но использован корректирующий экран, вычисленный в предыдущем случае, *и*, учи-

тывающий только Σ_0 — как результат изображение планеты неразличимо на уровне спекл-шума. Наконец, при вычислении изображения на рис. 7 *л* учтены также две aberrации в зрачке и в несопряженной плоскости $(\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA})$ и использован определенный четырехшаговым методом PSI корректирующий экран — как результат уровень сигнала планеты превосходит уровень спекл-поля, так что модельная планета визуально различима над уровнем шума.

Промежуточный вывод: метод PSI пошагового сдвига на половине зрачковой плоскости и сопряженной с плоскостью сложения волн в интерферометре вращательного сдвига на 180° хорошо применим для определения фазового распределения, используемого для коррекции ВФ, в том числе и искажений ВФ, обусловленных aberrациями необщего пути (Σ_{NCPA}) в несопряженных плоскостях.

4.4. Неточности и ошибки, допустимые при коррекции ВФ для визуализации планеты на рассеянном фоне звезды

В качестве критерия визуализации планеты на рассеянном фоне звезды можно считать усредненное по радиусу сечение (2D radial average). Так, если максимум, обусловленный сигналом планеты (на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ в рассмотренном случае), превышает другие максимумы, обусловленные спекл-шумом, то планету будем считать визуализированной или различимой на фоне звезды. Поэтому для последующего анализа приведены вычисленные как двумерные коронографические изображения, так и соответствующие усредненные по радиусу сечения.

На рис. 8 показано ухудшение качества коронографического изображения при неточности коррекции ВФ, вследствие возрастающего биннирования (binning). При биннировании шаг пикселя огрубляется, т. е. учитывается меньшее число пикселей в изображении. Физически при биннировании группа пикселей работает как один пиксель с усредненным значением. На рис. 8 *а, б* вычисления проводили с корректирующим экраном Σ' , учитывающим $\sim 400 \times 400$ пикселей (биннирование 1). Здесь имеющая начальный контраст $C^{-1} = 10^{-9}$ планета (и ее копия) на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ достоверно визуализированы на уровне фона. На рис. 8 *в, г* учтены $\sim 200 \times 200$ пикселей в зрачке Σ' (биннирование 2), на рис. 8 *д, е* $\sim 100 \times 100$ пикселей на зрачок Σ_0 (биннирование 4), как следствие планета (на $5\lambda/D$) становится все менее заметной

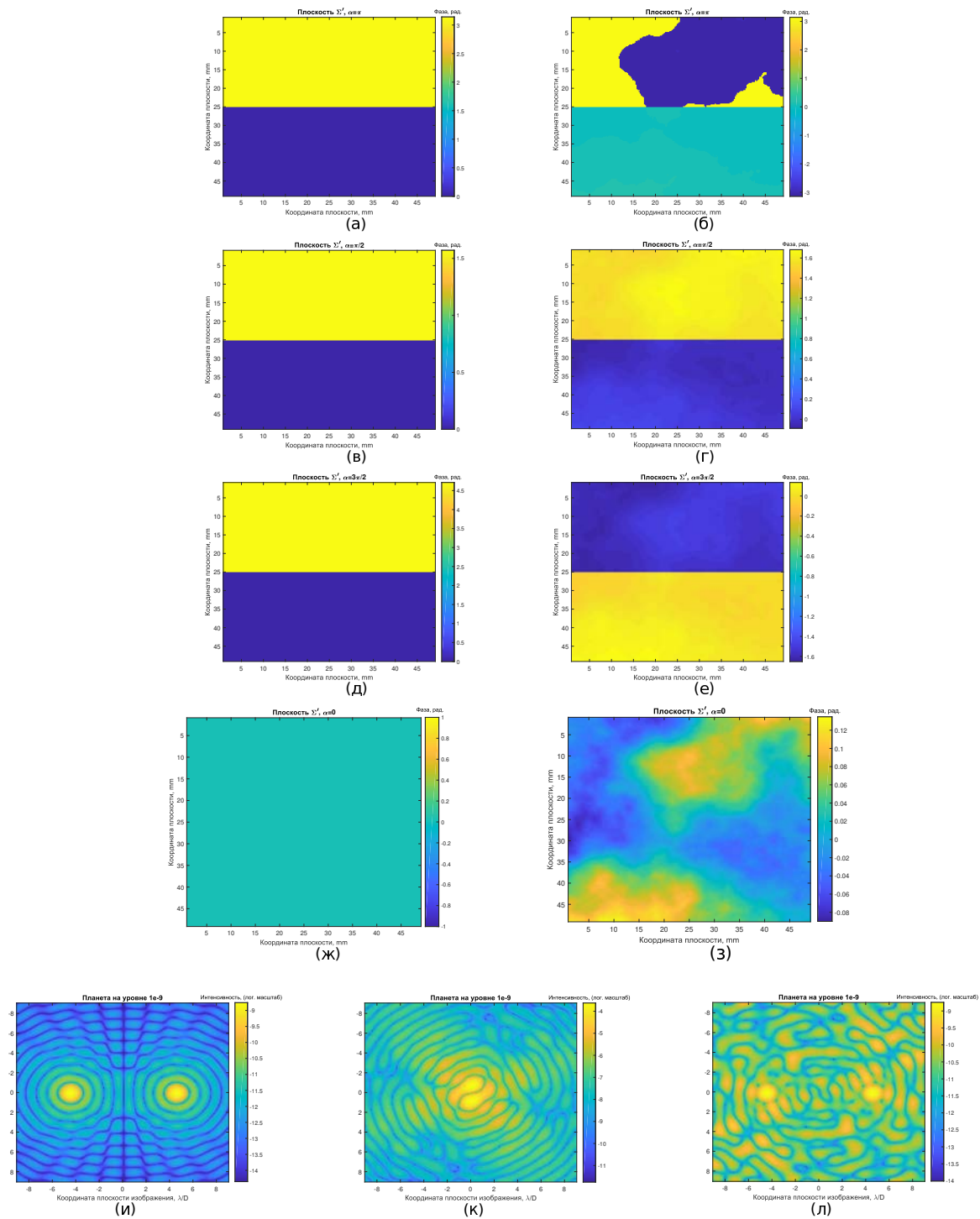


Рис. 7. Коронаграфические изображения для начального контраста $C = 10^9$, когда поданы aberrации Σ_0 или $(\Sigma_0 + \Sigma_{NCPA})$, определен и подан корректирующий фазовый компонент $-\phi(u', v')$

на уровне спекл-шума. При биннировании 8, когда корректируют только 50×50 пикселей (рис. 8 ж, з), сигнал планеты в усредненном радиальном сечении не превышает уровень шума — планета не визуализи-

зируется, согласно принятому выше критерию.

Таким образом, при рассмотренных уровнях искажений ВФ (СКО: $\sigma = 10$ нм в зрачке Σ_0 и $\sigma = 1$ нм в несопряженной плоскости Σ_{NCPA}) для визуализа-

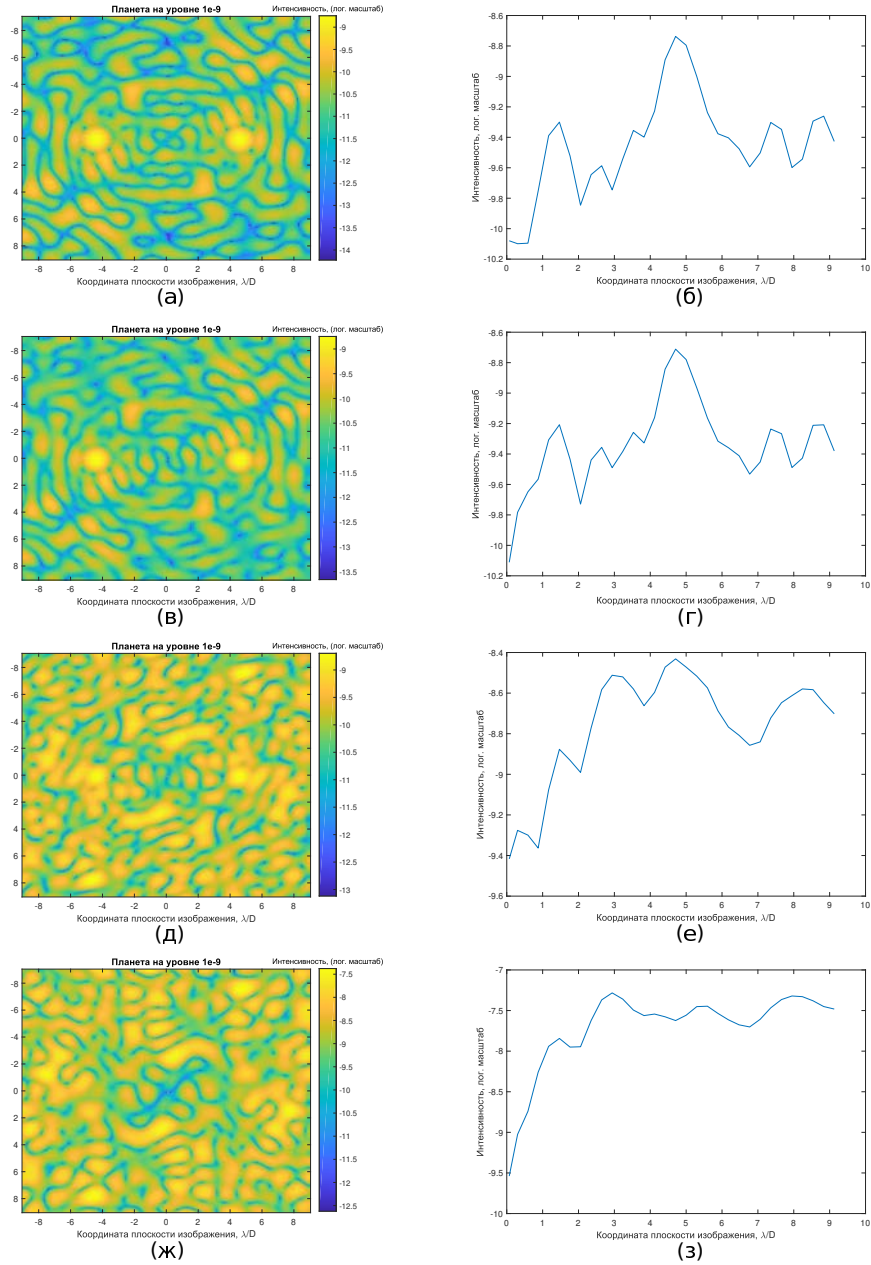


Рис. 8. Коронаграфические изображения (слева) планеты на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ с начальным контрастом $C^{-1} = 10^{-9}$ и соответствующие им радиальные сечения, усредненные по углу, (справа) при различных параметрах биннирования как уменьшения числа пикселей в зрачке Σ' , где находится АО. а), б) Биннирование = 1, $\approx 400 \times 400$ пикселей в Σ' . в), г) Биннирование = 2, $\approx 200 \times 200$ пикселей в Σ' . д), е) Биннирование = 4, $\approx 100 \times 100$ пикселей в Σ' . ж), з) Биннирование = 8, $\approx 50 \times 50$ пикселей в Σ'

ции планеты с начальным контрастом $C^{-1} = 10^{-9}$ на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ достаточно не менее 100×100 управляемых по фазе пикселей в зрачке. На первый взгляд этот вывод противоречит теореме Котельникова о достаточности $2N \times 2N$, где $N = 5$, т. е. 10×10 пикселей в зрачке оптиче-

ской системы для коррекции угловой частоты $f_{5\lambda/D}$. Но очевидно, что только фазовая коррекция зрачка не полностью решает поставленную задачу с теоретической точностью, так как аберрации Σ_{NCPA} в несопряженной плоскости имеют дополнительный эффект амплитудных аберраций, которые остаются

нескорректированными.

На рис. 9 показано ухудшение качества коронографического изображения при неточности коррекции ВФ, вследствие возрастающей ошибки корректирующего ВФ Σ' . Здесь в каждом (k, l) пикселе плоскости $\Sigma' = (u', v')$ вместо правильного корректирующего значения $-\phi(u', v')$ учтено значение фазы $-\phi(u', v') \pm \Delta\phi_{k,l}$ с ошибкой $\Delta\phi_{k,l}$, которая распределена по нормальному закону и рассчитывается в долях длины волны (λ/n) . Чтобы проследить допустимую ошибку коррекции ВФ, обусловленную неточностью АО, на рис. 9 биннирование = 1 везде, кроме последних рис. 9 и, к (биннирование = 4), для оценки совместного вклада биннирования и вклада неточности коррекции. На рис. 9 а, б ошибка АО составила малую величину $\Delta\phi \leq \lambda/10000$, так что наблюдают качественную коррекцию ВФ с уверенной визуализацией планеты (с начальным контрастом $C^{-1} = 10^{-9}$). На рис. 9 в, г ошибка коррекции АО составила уже величину $\Delta\phi \leq \lambda/1000$, так что коррекция ВФ все еще достаточна для визуализации планеты с $C^{-1} = 10^{-9}$. На рис. 9 д, е ошибка АО составила величину $\Delta\phi \leq \lambda/500$, и точность коррекции ВФ становится недостаточной для визуализации планеты с $C^{-1} = 10^{-9}$. В то же время, точность коррекции ВФ с ошибкой $\Delta\phi \leq \lambda/500$ достаточна для визуализации планеты с меньшим начальным контрастом $C^{-1} = 10^{-8}$, см. рис. 9 ж, з.

Совместный эффект биннирования = 4 и ошибки коррекции ВФ АО $\Delta\phi \leq \lambda/500$ показаны на рис. 9 и, к, что несколько ухудшает предыдущий результат, но остается удовлетворительным для визуализации планеты с контрастом $C^{-1} = 10^{-8}$ на фоне звезды. Возможно, более точным практическим критерием влияния ошибок может быть уровень спекл-шума на заданном астроцентрическом расстоянии при усреднении нескольких реализаций. Численное моделирование показывает, что для визуализации планеты с начальным контрастом $C^{-1} = 10^{-9}$ предъявляют очень высокие требования к точности коррекции ВФ фазовой адаптивной оптики, допустимая ошибка не ниже $\lambda/1000$ и число активных пикселей с фазовой коррекцией не менее 100×100 на площадь зрачка.

4.5. Эксперимент по измерению и коррекции ВФ в интерференционном коронографе

4.5.1. Схема лабораторного эксперимента

Схема интерференционного коронографа АИС-180° и фотография лабораторного эксперимента по-

казаны на рис. 10.

В эксперименте свет от гелий-неонового лазера проходит через пространственный фильтр и далее через коллимационную линзу (L_2), линейный поляризатор, фазовый пространственный модулятор LC-SLM в направлении интерференционного коронографа ИВС 180° (achromatic interfero-graph (AIC-180°)). Линзы L_3-L_4 оптически переносят зрачковую плоскость Σ' (рис. 5) (где установлен LC-SLM) в плоскость светоделителя ИВС 180°, где происходит сложение волн. После коронографа расположен еще один светоделитель (СД). В одном направлении (после светоделителя) создана плоскость изображения, там расположена CCD₁ (камера поля), с помощью которой наблюдают коронографическое изображение в фокальной плоскости. В другом направлении после светоделителя (СД) расположены дополнительная линза (L_6) для создания оптической плоскости вторичного зрачка, где расположена вторая CCD₂. В этой плоскости, оптически сопряженной со зрачком, определяли распределение ВФ, согласно алгоритмам (8)–(11). Между LC-SLM и коронографом линзы (L_3-L_4) согласовывают оптические плоскости зрачка Σ' (рис. 5), где установлен LC-SLM, и плоскость зрачка Σ'' (рис. 5), где установлен коронограф. Плоскость Σ'' совмещена с плоскостью светоделителя ИВС 180°, где происходит суперпозиция (сложение) интерферирующих волн.

В лабораторном эксперименте мы использовали более доступный (в коммерческом плане в России) жидкокристаллический (ЖК) фазовый пространственный модулятор, вместо прецизионного деформируемого зеркала. Это имеет некоторые преимущества и некоторые недостатки, которые целесообразно отметить в контексте функционирования АО для коронографа.

В числе преимуществ ЖК фазового пространственного модулятора (phase-only LC-SLM [18]) следует отметить существенно большее число адресуемых пикселей более $1500 \times 1000 = 1.5 \cdot 10^6$ по сравнению с меньшим числом актуаторов ДЗ $\sim 10^3 \dots 10^4$. Также возможна амплитудно-фазовая и поляризационная модуляции при использовании поляризационных устройств. Амплитудно-фазовая модуляция происходит, например, при постановке поляризатора до и после LC-SLM, при углах пропускания, отличающихся от направления главной (поляризационной) оси LC-SLM. Возможна реализация произвольной поверхности ВФ, в том числе и с разрывами ВФ, что практически невозможно с ДЗ. В числе основных недостатков следует от-

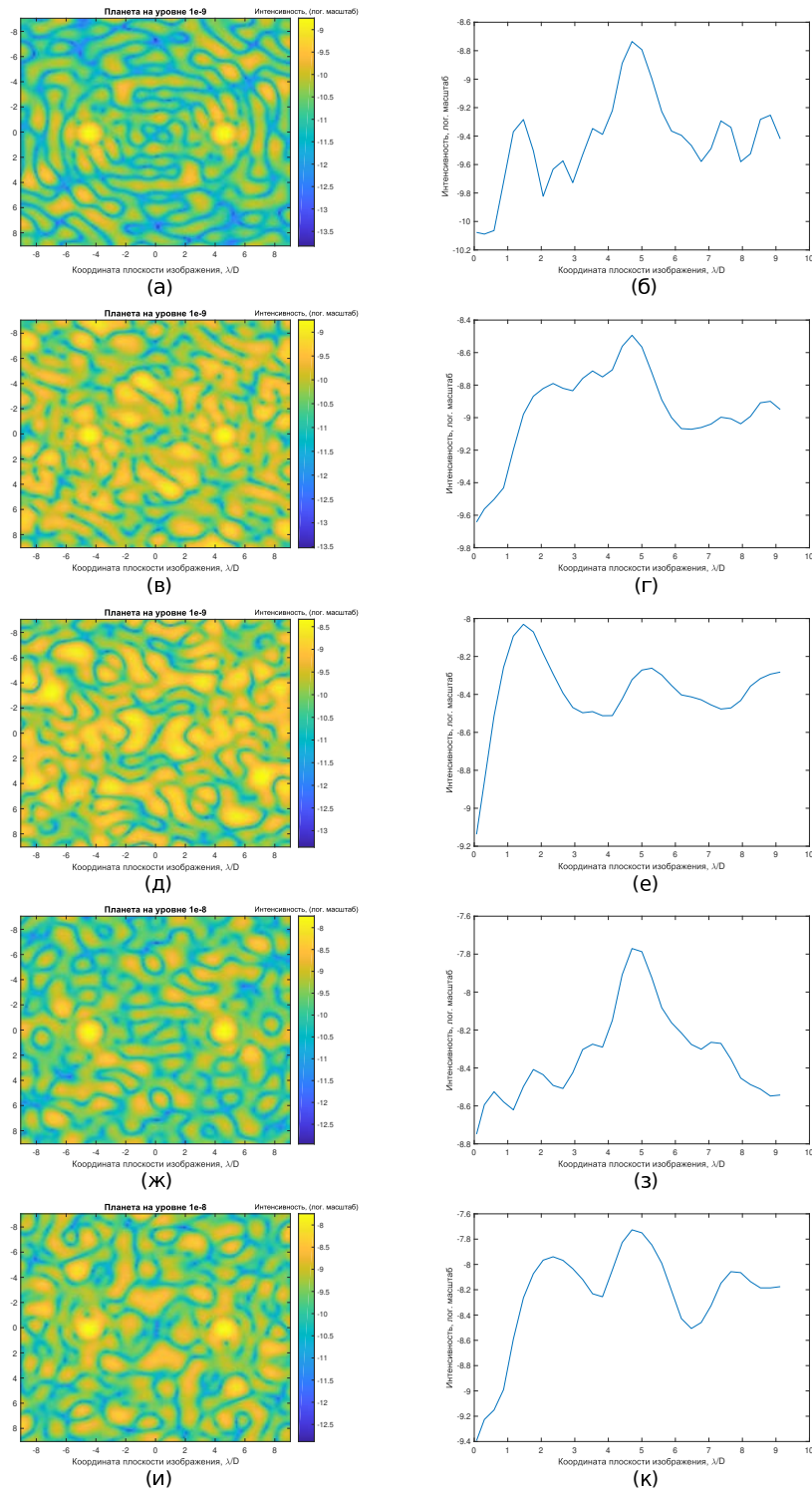


Рис. 9. Коронаграфические изображения (слева) планеты на астроцентрическом расстоянии $5\lambda/D$ с начальными контрастами $C^{-1} = 10^{-9}$ а)–е) и 10^{-8} ж)–к) и соответствующие им радиальные сечения, усредненные по углу (справа), при различной величине ошибки $\Delta\phi$ АО в зрачке Σ' при подаче корректирующей фазы $-\phi$ (по величине СКО): а), б) $\Delta\phi \leq \lambda/10000$ (биннирование = 1); в), г) $\Delta\phi \leq \lambda/1000$ (биннирование = 1); д), е), ж), з) $\Delta\phi \leq \lambda/500$ (биннирование = 1); и), к) $\Delta\phi \leq \lambda/500$ (биннирование = 4)

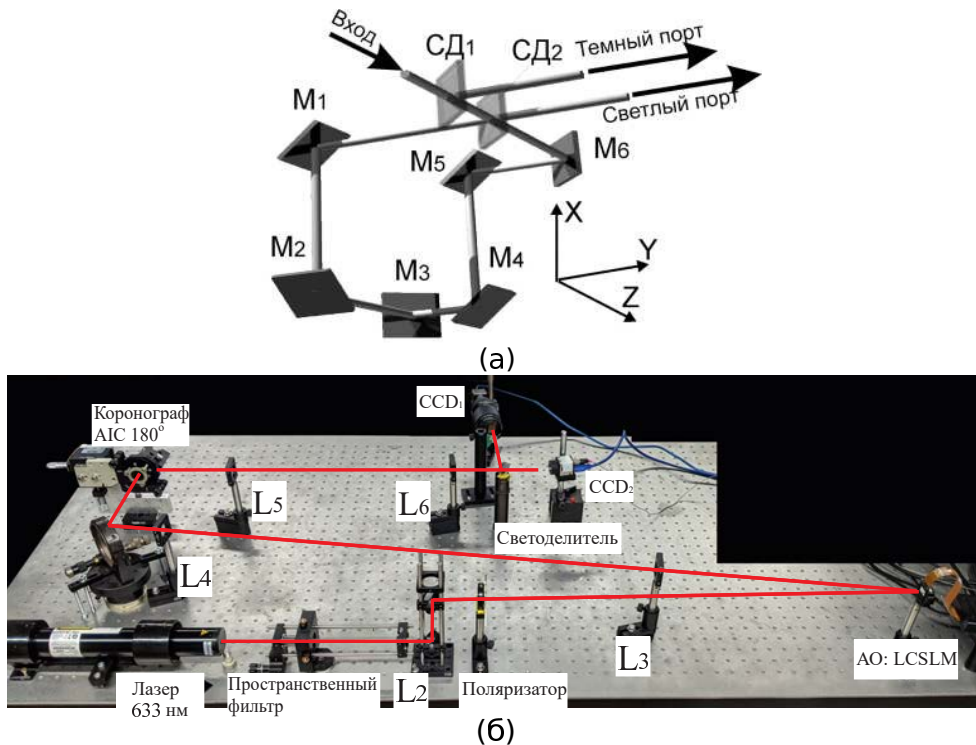


Рис. 10. Оптическая схема интерференционного коронографа вращательного сдвига на 180° (а) и фотография (б) лабораторного эксперимента по коррекции ВФ с измерением искажений ВФ после интерференционного коронографа. Обозначены лазер, пространственный фильтр: линза L_1 , линза-коллиматор L_2 , линейный поляризатор, ЖК пиксельный (пространственный) модулятор света (phase-only LC-SLM), интерференционный коронограф (AIC- 180°) (показан в увеличенном размере на рис. а)), светоделитель, фокусирующие линзы L_3 – L_5 , CCD_1 (камера поля), фокусирующая линза L_6 для формирования зрачковой плоскости, CCD_2 (в зрачковой плоскости)

метить, в первую очередь, существенно меньшую точность фазовой модуляции, номинально $\lambda/100$ – $\lambda/200$ ($\approx 5\pi/2^8 = 2.5\lambda/256$), что недостаточно для наблюдения экзопланет, наличие фликера (дрожания) фазы. Также имеются отличные от ДЗ краевые эффекты пикселей, обусловленными физическими границами пикселей, относительные размеры модулируемой и не модулируемой зон описывает fill factor. Между актуаторами ДЗ нет видимых границ (со стороны мембранного зеркала), но применяют функцию (form-factor), которая наиболее точно аппроксимирует фазовое распределение по дискретному числу актуаторов, учитывая особенности соединения актуаторов с мембранным с ДЗ и реакцию соседней зоны (crosstalk). Наконец, следует учитывать хроматизм LC-SLM, вследствие дисперсионных свойств материала ЖК, по сравнению с ДЗ с эффективной свободной дисперсией d оптической длины пути, d/λ .

Проанализируем основной недостаток по точности ЖК пространственного модулятора и ука-

жем возможные способы функционирования LC-SLM для звездного коронографа. Для эффективного увеличения точности фазовой модуляции (более чем на порядок) возможно применение принципа (существенно) несбалансированного интерферометра [19]. Так, в двухлучевом интерферометре можно сложить две когерентные волны с неравными амплитудами, например, различающимися на порядок (в общем случае в k раз). Внутри несбалансированного интерферометра в одном плече фазу волны, с меньшей амплитудой, корректируют, при этом учитывают точность фазовой модуляции. В другом плече интерферометра модуляцию фазы волны не проводят и интерференционно складывают волны на светоделителе. Если измерить глубину фазовой модуляции результирующей волны (после сложения), то она окажется меньше чем глубина фазовой модуляции слабой по амплитуде волны. Таким образом, возможно эффективно уменьшить ошибку модуляции. Подробное описание этого метода можно найти в [19]. В настоящей работе

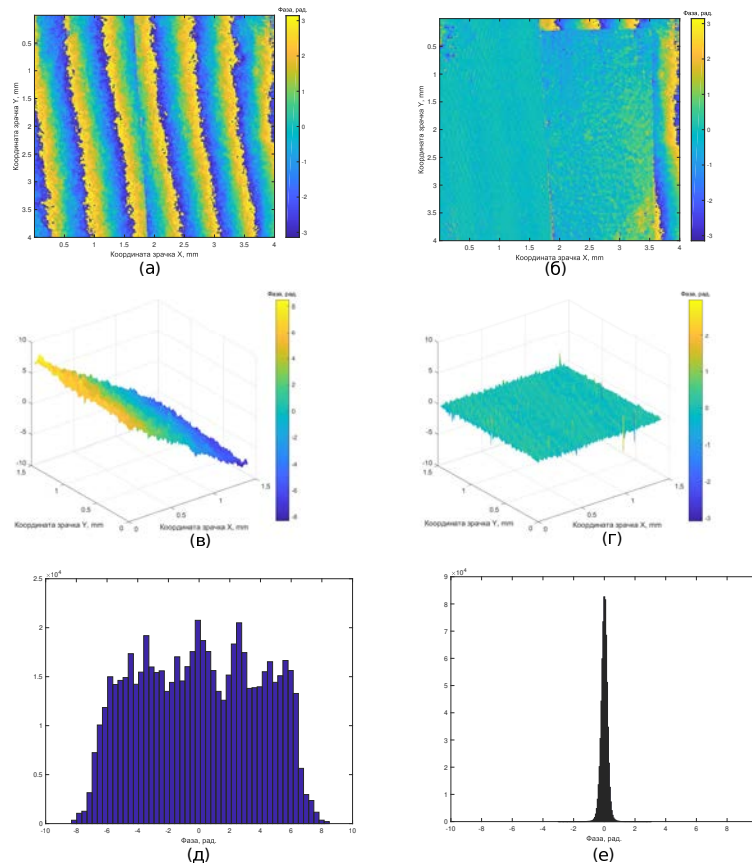


Рис. 11. Коррекция ВФ, содержащего наклон плоскости зрачка более чем на 2.5λ : а) нескорректированный ВФ, б) скорректированный ВФ, в), г) нескорректированный и скорректированный фрагменты ВФ с соответствующими гистограммами отсчетов д, е

отметим, что под атмосферой ВФ искажен турбуленцией и содержит значительную ошибку ВФ, превышающую несколько длин волн оптического диапазона. Метод несбалансированного интерферометра увеличит точность коррекции ВФ, если ошибка ВФ существенно меньше длины волны λ (хотя бы на порядок $\sim \lambda/10 \dots \sim \lambda/100$). Поэтому для точной коррекции ВФ в режиме наземного телескопа возможно использовать два пиксельных исполнительных элемента с точностью порядка $\lambda/100$, один из которых установлен на входе перед несбалансированным интерферометром, а другой внутри интерферометра в плече с меньшей амплитудой. В заатмосферном космическом телескопе получают дифракционно-ограниченное изображение, так что искажение ВФ обычно в несколько раз меньше центральной длины волны λ . Здесь также можно использовать LC-SLM в несбалансированном интерферометре, в квазистатическом режиме по быстродействию корректирующей АО.

4.5.2. Экспериментальные результаты по коррекции ВФ

Вначале покажем некоторые результаты коррекции ВФ по измерениям в зрачковой плоскости на CCD₂, см. рис. 10.

На рис. 11 показан результат эксперимента по коррекции больших искажений волнового фронта, превосходящих по диапазону длину волны λ (одну полосу интерференции), в данном случае, наклон плоскости зрачка был в диапазоне более чем 2.5λ . Нескорректированное распределение ВФ, показанное на рис. 11 а, было скорректировано, см. рис. 11 б, в активной области модулятора LC-SLM с применением методики, описанной выше. Достигнутая точность ($\sigma \approx \lambda/30$) восстановления ВФ получена в результате двух итераций. Вторая итерация эффективно компенсирует нелинейность фазового отклика LC-SLM при искажениях в большом диапазоне. На рис. 11 в, г показаны профили фазовых поверхно-

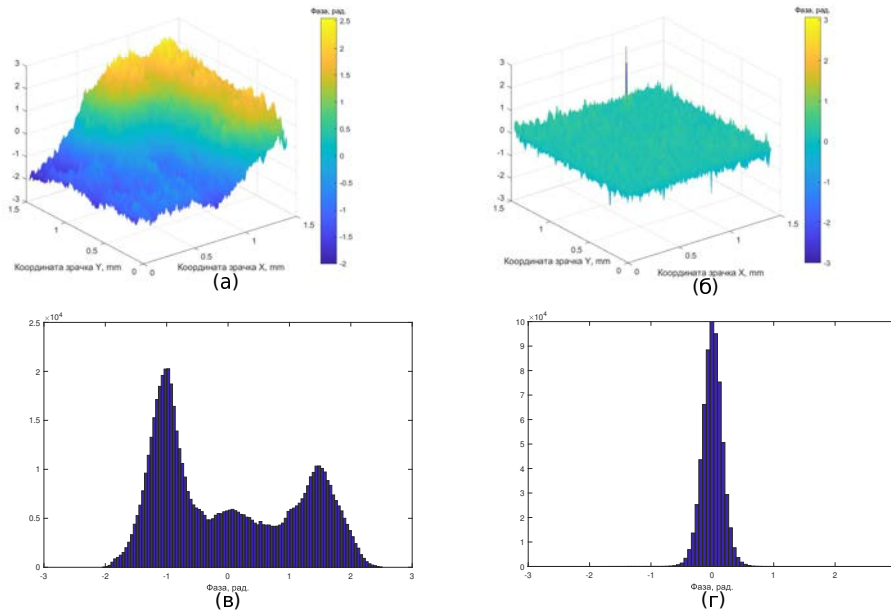


Рис. 12. Коррекция ВФ: а) нескорректированный ВФ, б) скорректированный ВФ, с соответствующими гистограммами отсчетов в, г

стей фрагмента предыдущих изображений до коррекции и после соответственно. На рис. 11 д, е приведены соответствующие гистограммы. После коррекции волновой фронт имеет среднеквадратичное отклонение $\sigma \approx \lambda/30$.

Результат коррекции распределения ВФ, более сложного, чем наклон, показан на рис. 12. Нескорректированное распределение ВФ, показанное на рис. 12 а, было скорректировано, как показано на рис. 12 б. Соответствующие гистограммы отсчетов фазы ВФ приведены на рис. 12 в и г. После коррекции волновой фронт имеет среднеквадратичное отклонение $\sigma \approx \lambda/40$.

На рис. 13 показана коррекция практически плоского ВФ со среднеквадратичным отклонением $\sigma \approx \lambda/5$ (по фрагменту нескорректированного ВФ). Нескорректированный ВФ показан на рис. 13 а, скорректированные поочередно левая и правая части показаны на рисунках б и в соответственно. В оптической схеме данного эксперимента (см. рис. 10) пространственный модулятор фазы был установлен до ИВС 180° , что позволяет скорректировать симметричные искажения ВФ одновременно на двух половинах зрачковой плоскости. Но несимметричные искажения ВФ (возникающие непосредственно внутри интерферометра) можно скорректировать только поочередно или на левой, или на правой половинах зрачковой плоскости, рис. 13 б и в со-

ответственно. При анализе спектра мощности ошибок, усредненного по радиальным сечениям (radially averaged power spectrum density, PSD), на полуплоскости зрачка до коррекции (показан синей пунктирной линией) и после (показан красной сплошной линией) видно на рис. 13 г, что эффективно корректируются (более чем на порядок) неоднородности с пространственными частотами (с характерным размером) менее $1/10$ полуапертуры, тогда как более высокие пространственные частоты не корректируются.

Отсутствие коррекции средних и высоких частот можно объяснить присутствием aberrаций необщего пути, которые обуславливают нескорректированные амплитудные ошибки на средних и высоких частотах.

Эксперименты по коррекции ВФ (аналогично, показанным выше в зрачковой плоскости) также наблюдали в фокальной плоскости на CCD_1 , где фиксировали коронографические изображения. Так, на рис. 14 показаны изображения (в логарифмическом масштабе по вертикальной шкале интенсивности), полученные в эксперименте: а — некоронографическое изображение (аналогично изображению на светлом порте интерферометра) — фактически изображение точечного источника (ФРТ) с хорошо наблюдаемыми кольцами Эйри, при экспозиции 0.02 мс; б — коронографическое изображение,

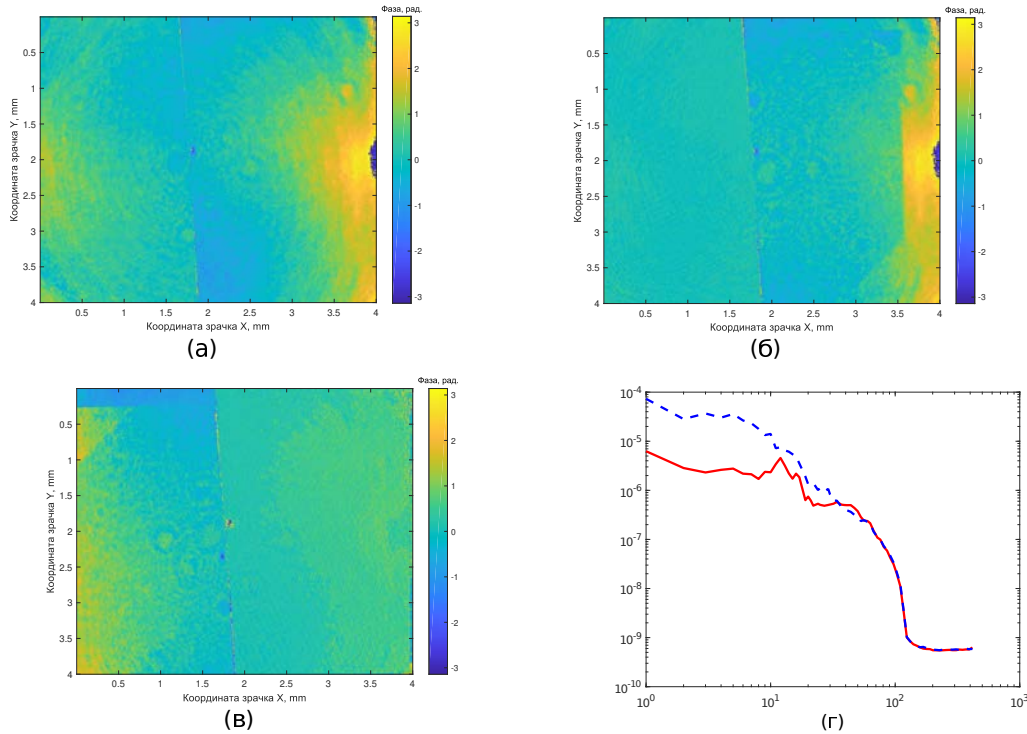


Рис. 13. Коррекция плоского ВФ: а) нескорректированный ВФ; б), в) скорректированные левая и правая полуплоскости; г) усредненный по радиальным сечениям спектр мощности ошибок (PSD), синяя штриховая линия — до коррекции, красная сплошная линия — после коррекции

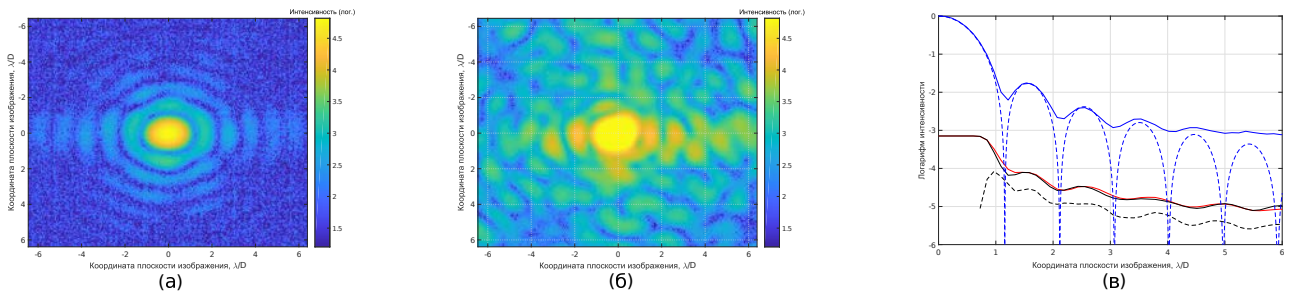


Рис. 14. Экспериментальные изображения. а) Некоронаграфическое изображение (экспозиция 0.02 мс). б) Коронаграфическое изображение, при коррекции ВФ приблизительно с $\sigma \approx \lambda/40$ (экспозиция ≈ 30 мс). в) Усредненные радиальные сечения: синяя сплошная линия для некоронаграфического изображения а, красная сплошная линия для коронаграфического изображения б, синяя штриховая линия для радиального сечения теоретической ФРТ, черная сплошная линия — сечение другой реализации в другой момент времени коронаграфического изображения, черная штриховая линия — усредненное сечение разности двух коронаграфических изображений

полученное при коррекции ВФ приблизительно со среднеквадратичным отклонением $\sigma \approx \lambda/40$. Здесь при экспозиции ≈ 30 мс хорошо видно спекл-поле на астроцентрическом расстоянии (от центра ФРТ) на месте колец Эйри. По изображениям рис. 14 а и б были построены усредненные радиальные сечения, показанные на рис. 14 в синей сплошной и

красной сплошной линиями соответственно. Также на рис. 14 в показаны радиальное сечение теоретической ФРТ $(2J_1(r)/r)^2$ — синяя штриховая линия, усредненное радиальное сечение другой реализации в другой момент времени изображения, аналогично б — черная сплошная линия и радиально усредненное сечение разности двух коронаграфических

изображений, полученных в разные моменты времени — черная штриховая линия. Разность коронографических изображений подразумевает постобработку, при которой так называемые статические (static) спеклы допускают вычитание и показывают возможность дополнительного выигрыша в коронографическом контрасте.

В астроцентрической области шире, чем второе кольцо Эйри ($< 2\lambda/D$), нами экспериментально получен контраст, в 10^5 превышающий значение ФРТ в максимуме. При достаточной статистике спекл-поля постобработка способна улучшить это значение еще на два порядка, что пока не показано в данном лабораторном эксперименте и, по-видимому, требует большей статистики изображений.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали как теоретически, так и в модели, а также и в лабораторных экспериментах новую методику коррекции ВФ для задачи наблюдения экзопланет в астрономическом дифракционно-ограниченном изображении в окрестности звезды на астроцентрическом расстоянии в несколько дифракционных радиусов от родительской звезды. Предложенная методика работоспособна в части измерения и коррекции волнового фронта. В частности, для визуализации Земли в окрестности Солнца с контрастом 10^9 требуется получить точность коррекции лучше $\lambda/500$ на управляемых 500×500 пикселях.

Согласно приведенным зарубежным публикациям практически возможно получить ограниченную зону в плоскости изображения, где рассеянный фон излучения звезды (спекл-поле) ослаблен до уровня детектирования слабого сигнала от экзопланеты и где неосевой сигнал экзопланеты практически не ослаблен. Это достигается комбинацией сверхточных систем АО и масочного коронографа Лио. В процессе коррекции ВФ нетривиальной задачей является измерение ВФ после коронографа, где учтены аберрации необщего пути, из-за чего стандартные измерители ВФ (датчики Гартмана и др.) оказываются неточными и содержат дополнительные источники ошибок. Предложенный нами новый метод измерения и коррекции ВФ в настоящее время доведен до экспериментального качества волнового фронта лучше $\lambda/40$, что пока примерно на порядок хуже целевого показателя ($\lambda/500$). Несмотря на это достижение целевой точности коррекции ВФ будет совершенствоваться в дальнейшей работе с возможным привлечением дополнительных методик. При

достигнутой точности коррекции показан экспериментальный коронографический контраст, лучше, чем 10^5 , на астроцентрическом расстоянии более 2 дифракционных радиусов $2\lambda/D$ на длине волны 633 нм.

Финансирование. Авторы признательны Правительству Российской Федерации и Министерству высшего образования и науки РФ за поддержку в рамках гранта № 075-15-2020-780 (№ 13.1902.21.0039).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Traub and B. Oppenheimer, in *Exoplanets*, ed. by S. Seager, University of Arizona Press, Tucson, Arizona, (2011), pp. 111–156.
2. A.V. Yudaev, O.Y. Yakovlev, A.V. Kiselev et al., *Sol. Syst. Res.* **55**, 367 (2021).
3. O. Guyon, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **56**, 315 (2018).
4. D. Mawet, L. Pueyo, P. Lawson et al., *ArXiv astro-ph/arXiv:1207.5481*.
5. O. Guyon, E.A. Pluzhnik, M.J. Kuchner et al., *Astrophys. J.* **167**, 81 (2006).
6. N.J. Kasdin, V.P. Bailey, B. Mennesson et al., *Proc. SPIE* **11443**, *Space Telescopes and Instrumentation 2020: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, 114431U (2020).
7. A. Tavrov, S. Kameda, A. Yudaev et al., *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* **4**, 044001 (2018).
8. P.N. Frolov, B.B. Shkurskii, A.V. Kiselev et al., *Sol. Syst. Res.* **47**, 477 (2013).
9. Дж. Гудмен, *Введение в фурье-оптику*, Мир, Москва (1970).
10. H. Yang and X. Li, in *Simulated Annealing, Theory with Applications*, ed. by R. Chibante, IntechOpen, London, UK (2010), Ch. 15, p. 275.
11. Y. Liu, J. Ma, B. Li et al., *Proc. SPIE* **8415**, *6th International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing Technologies: Large Mirrors and Telescopes*, 841504 (2012).
12. P.J. Bordé and W.A. Traub, *Astrophys. J.* **638**, 488 (2006).
13. Jo. L. Sayson, G. Ruane, D. Mawet et al., *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* **5**, 019004 (2019).
14. A.V. Tavrov, Y. Kobayashi, Y. Tanaka et al., *Opt. Lett.* **30**, 2224 (2005).

15. *Оптический производственный контроль*, под ред. Д. Малакары, Машиностроение, Москва (1985).
16. M. Beaulieu, L. Abe, P. Martinez et al., Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **469**, 218 (2017).
17. J. Krist, A.J. Riggs, J. McGuire et al., Proc. SPIE **10400**, *Techniques and Instrumentation for Detection of Exoplanets VIII*, 1040004 (2017).
18. <https://holoeye.com/spatial-light-modulators/>.
19. I. Shashkova, B. Shkursky, P. Frolov et al., J. Astron. Telesc. Instrum. Syst. **2**, 011011 (2015).

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СМЕСЕВОЙ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНОЙ КОМПОЗИЦИИ ФТАЛОЦИАНИНА ЦИНКА И ФУЛЛЕРЕНА $\text{ZnPc}:\text{C}_{70}$

*В. В. Лазарев, А. Р. Гейвандов, С. П. Палто**

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук
119333, Москва, Россия,*

Поступила в редакцию 12 июня 2022 г.,
после переработки 12 июня 2022 г.
Принята к публикации 15 августа 2022 г.

Изучены спектральные особенности ампер-ваттной чувствительности фотоэлектрических структур, включающих прозрачный ИТО-электрод, фоточувствительный органический слой и алюминиевый электрод, сформированных на подложке из кварцевого стекла. В качестве активного фоточувствительного слоя использованы вакуумно-напыленные пленки как индивидуальных органических соединений фталоцианина цинка (материал ZnPc известен как обладающий донорными свойствами), фуллерена (C_{70} -акцептора), так и донорно-акцепторной композиции $\text{ZnPc}:\text{C}_{70}$. С помощью компьютерного моделирования для всех трех структур в широком спектральном диапазоне была определена структура полос поглощения. Это позволило рассчитать отраженную и поглощенную доли падающего на образцы излучения и объяснить особенности спектрального поведения ампер-ваттной чувствительности смесевой композиции $\text{ZnPc}:\text{C}_{70}$. Показано, что в смесевой композиции максимальная фоточувствительность реализуется в области перекрытия полос поглощения донорных и акцепторных молекул.

DOI: 10.31857/S0044451023020025
EDN: OPNGPY

1. ВВЕДЕНИЕ

Фоточувствительные наноструктуры органических материалов привлекают все большее внимание из-за возможности их конкурентного применения в приборах и устройствах современной наноэлектроники и фотоники. Преимущество органических пленок перед неорганическими — это их заметная дешевизна, вытекающая из относительно недорогой технологии их формирования (в том числе на гибких подложках, без высоких температур и высокого вакуума), возможность выбора из огромной номенклатуры органических веществ необходимых химических соединений, обладающих требуемыми физико-химическими и оптическими свойствами, и создание на их основе композиционных материалов простым смешиванием отдельных компонентов. Большое внимание в последние десятилетия уделяется фотовольтаическим органическим структурам [1–4],

используемым не только для преобразования световой (солнечной) энергии в электрическую [5–10], но и для детектирования электромагнитных сигналов в различных спектральных диапазонах [11–14], селективного детектирования различных химических веществ [15] и др.

В органических фотовольтаических гетероструктурах часто используются донорные (D) и акцепторные (A) материалы, которые более эффективно себя проявляют именно в смесевых композициях (по сравнению со слоевыми органическими гетероструктурами) [3, 16]. При этом, наряду с полимерными материалами, широко используются и композиции низкомолекулярных органических соединений: фталоцианинов (доноров CuPc , ZnPc) с фуллеренами (акцепторами C_{60} и C_{70}) [17–20]. В смесевой композиции из-за взаимодействия близко расположенных молекул донора и акцептора образуется множество микроскопических гетеропереходов, хаотично распределенных по объему пленки — так называемые объемные гетеропереходы (bulk heterojunctions) [21–24]. Поглощенный свет возбуж-

* E-mail: sergei.palto@gmail.com

дает в активном донорно-акцепторном слое экситоны [25], которые затем могут диссоциировать на электроны и дырки и создавать ток во внешней цепи. Поглощение фотона донорно-акцепторной смесью является первичным актом в фотоэлектрическом процессе, влияющем на конечную спектральную фоточувствительность всего фотоэлектрического устройства. В связи с этим возникает вопрос, как соотносятся спектры поглощения и спектральная фотоэлектрическая (ампер-ваттная) чувствительность пленок из отдельных компонентов смеси с соответствующими спектральными особенностями поглощения света смесевой пленкой при учете всех элементов фотоэлектрических структур, включая систему электродов.

Для выяснения особенностей спектрального поведения фоточувствительности композиционного смесового материала $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ в широком спектральном диапазоне (240–1050 нм) были измерены спектры фотоэлектрической чувствительности образцов, которые, естественно, наряду с пленкой на основе смесовой композиции $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ или отдельных компонентов смеси (фталочинина цинка ZnPc и фуллерена C_{70}), включают и электроды. С помощью экспериментальных спектров пропускания пленок указанных веществ были построены и численно изучены модели этих слоев структур. Численные исследования выполнены с использованием метода конечных разностей во временном домене (FDTD — Finite Difference Time Domain) для решения уравнений Максвелла [26]. Это позволило определить оптические спектры доли поглощенного потока излучения, падающего на соответствующие слоевые структуры, и выявить основные особенности спектрального поведения фоточувствительности смесового композиционного материала $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ в широком диапазоне длин волн.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

В данной работе исследуется композиционный материал, составленный из смеси двух веществ: фталочинина цинка ZnPc — донора и фуллерена C_{70} — акцептора. Подбор веществ для смесовых композиций требует серьезного изучения свойств каждого компонента смеси в отдельности. В нашем случае выбор компонентов смесовой донорно-акцепторной композиции обусловлен следующими обстоятельствами. Известно, что фталочинины металлов образуют, как правило, молекулярные комплексы, характеризующиеся при оптическом воз-

буждении состояниями с переносом заряда, и многие из них проявляют полупроводниковые и фотополупроводниковые свойства [27]. В ряду фталочининовых металлокомплексов полезным набором фотофизических свойств (большое время жизни возбужденных состояний [28], высокая стабильность и ряд других особенностей [29]) для построения преобразователей обладает фталочинин цинка ZnPc . Спектр поглощения ZnPc (как и других фталочининовых комплексов) состоит из ряда очень интенсивных полос, наиболее важные из которых — это полоса Soret (340–360 нм) и Q -полоса (650–850 нм). В длинноволновой области (600–700 нм) Q -полоса характеризуется двумя расщепленными электронными переходами, соответствующими двум пикам поглощения. В кристаллическом поле имеет место расщепление этих электронных переходов с образованием экситонных зон [30] и наблюдается соответствующее значительное уширение Q -полосы — её правый край может заходить в ближнюю ИК-область. С другой стороны, в области 400–600 нм имеется провал в спектрах поглощения фталочининовых комплексов, в том числе и для ZnPc . Этот провал хорошо компенсируется широкой полосой поглощения фуллерена C_{70} , расположенной именно в этой области. Таким образом, даже для тонких (~ 100 нм) пленок смесовая донорно-акцепторная композиция $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ обеспечивает интенсивное поглощение излучения в широком диапазоне длин волн от ближней УФ-области до ближней ИК-области спектра.

Пленки органических веществ ZnPc , C_{70} и их смесовой композиции $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ наносились на кварцевые подложки ($20 \times 25 \text{ мм}^2$) с предварительно нанесенной полоской ИТО-электрода ($5 \times 25 \text{ мм}^2$) методом термического вакуумного испарения порошков исходных веществ ZnPc , C_{70} либо их смеси $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ в камере вакуумной установки ВУП-4. Испарители для вакуумного напыления изготавливались из листового молибдена толщиной 0.13 мм. Порошки исходных веществ ZnPc (НИОПИК) (~ 1.7 мг), C_{70} (МГУ) (~ 2.1 мг) либо их смесь $\text{ZnPc} : \text{C}_{70}$ (~ 3.8 мг) помещались в молибденовые испарители. В процессе термического испарения в вакууме при заполнении ловушки жидким азотом давление в камере варьировалось от $(6-8) \cdot 10^{-6}$ до $1.2 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст. Сверху, перпендикулярно полоске ИТО-электрода, методом вакуумного напыления наносилась полоска алюминиевого электрода шириной 4 мм при толщине пленки Al, равной 30 ± 5 нм. Площадь области перекрытия нижнего (ИТО) и верхнего (Al) электродов (площадь активного элемента) составляла $5 \times 4 \text{ мм}^2$. Та-

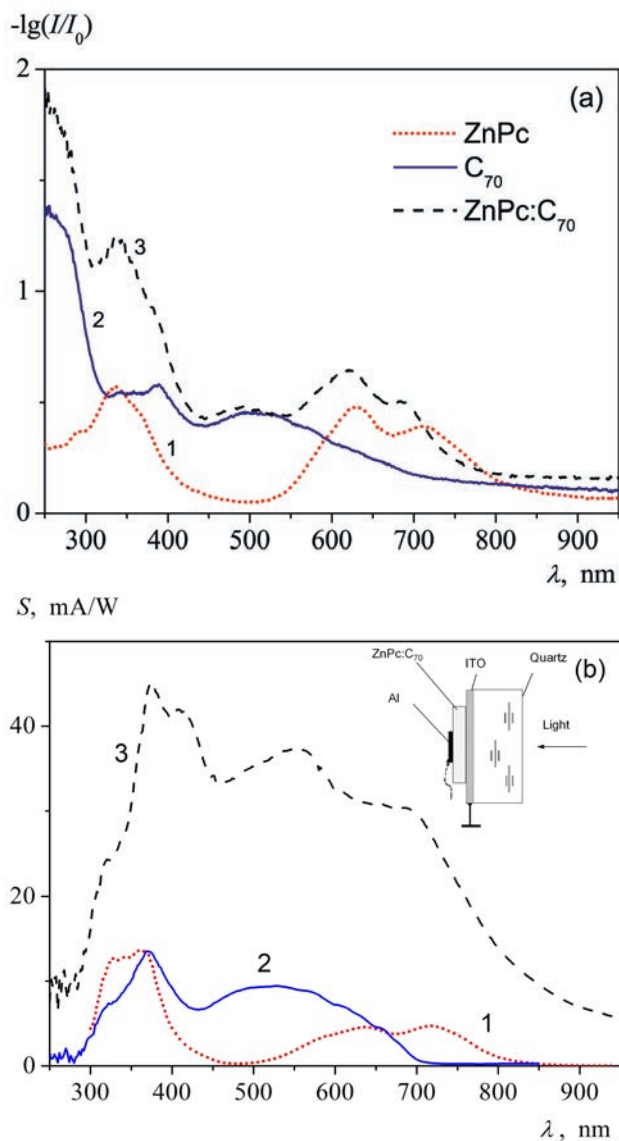


Рис. 1. Спектры пропускания образцов с пленками ZnPc, C_{70} и их композиции ZnPc : C_{70} (a) и ампер-ваттной чувствительности S (b) структур на основе пленок: ZnPc (кривая 1), C_{70} (кривая 2) и композиции ZnPc : C_{70} (кривая 3). На вставке показана слоевая структура образца ITO–ZnPc : C_{70} –Al на кварцевой подложке

ким образом, на трех подложках были сформированы три отдельные структуры типа «ITO–органическая пленка–Al» с фотоактивными пленками ZnPc, C_{70} и смеси ZnPc : C_{70} (на вставке рис. 1 показана схема образца с пленкой ZnPc : C_{70}). После напыления органической пленки её толщина измерялась с использованием интерферометра Линника (ЛОМО МИИ-4) в области образца, свободной от электрода.

Измерения спектров оптического пропускания гибридных структур (в области перекрытия нижнего ITO- и верхнего Al-электрода) проводились с использованием установки на базе поляризацион-

ного микроскопа Olympus CX31-PF5 и оптоволоконного спектрометра Avantes AvaSpec-2048-USB2-UA. Спектральный диапазон измерений спектров пропускания образцов составлял 240–1000 нм. Этот диапазон охватывает основные полосы поглощения ZnPc, C_{70} и смесевой композиции ZnPc : C_{70} . Впоследствии эти спектры использовались для создания компьютерных моделей слоевых структур, включающих электроды.

Для измерения фотоэлектрических свойств использовалась специально созданная установка на базе монохроматора ЛОМО МДР-23 и комплекса измерительно-управляющих виртуальных приборов PhysLab, созданных нами как для управления монохроматором, так и для цифровой регистрации сигналов фотоэлектрического отклика. Спектры фотоэлектрического отклика регистрировались на переменном токе с использованием фазочувствительного детектирования. Световой поток от галогенной лампы, установленной перед монохроматором, модулировался механическим прерывателем на частоте 300 Гц и после монохроматора фокусировался системой кварцевых линз в область активного элемента со стороны прозрачного ITO-электрода. Использование фазочувствительной регистрации сигнала на переменном токе имеет множество преимуществ. Наряду с точностью и широким динамическим диапазоном регистрации сигнала, фазочувствительный метод позволяет исключить использование в структуре образцов специальных согласующих слоев [12], устраняющих барьеры для протекания постоянного фототока. Протекание переменного фототока обеспечивается благодаря электрической емкости барьерных слоев. Эквивалентная электрическая схема фотоприемника на основе смесевой композиции ZnPc : C_{70} без согласующих слоев подробно обсуждается в работе [30].

На рис. 1 показаны экспериментальные спектры оптического пропускания образцов пленок ZnPc, C_{70} и композиции ZnPc : C_{70} , представленные на логарифмической шкале как $-\lg(I(\lambda)/I_0(\lambda))$, где $I_0(\lambda)$ — спектр интенсивности света до образца, а $I(\lambda)$ — спектр интенсивности света, прошедшего через образец (рис. 1a), и спектры ампер-ваттной чувствительности S (рис. 1b) активных элементов образцов на основе этих пленок. Отметим здесь, что фототок фотоэлектрическая чувствительность образца с пленкой из композиционного материала ZnPc : C_{70} значительно выше, чем соответствующая фоточувствительность образцов с ZnPc или с C_{70} (примерно в 6 раз, например, на длине волны $\lambda = 650$ нм, рис. 1b).

Поскольку измеренные спектры пропускания зависят и от отраженной доли света от множества границ: воздух – стекло, ИТО – стекло, ИТО – органическая пленка, органическая пленка – Al, а экспериментальные измерения спектров отражения крайне затруднительны, то для прояснения вопроса о доли энергии, поглощаемой образцами, были построены математические модели слоевых структур с учетом оптических характеристик электродных слоев и активного фоточувствительного слоя. Численным моделированием для каждой структуры были определены их спектральные характеристики (структура полос поглощения, отраженная, поглощенная и прошедшая доли падающего на образец излучения) в широком диапазоне длин волн.

3. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для решения оптических задач использовалось созданное в лаборатории программное обеспечение (С.П. Палто), основанное на решении уравнений Максвелла методом конечных разностей во временном домене (FDTD — finite difference time domain) [26]. Применительно к нашему эксперименту метод FDTD частично изложен в работе [31].

В FDTD-методе во времени решается система уравнений Максвелла, а также система дифференциальных уравнений, описывающих свойства материалов, взаимодействующих с излучением. В частотном домене эти дополнительные к уравнениям Максвелла дифференциальные уравнения соответствуют материальным уравнениям, определяющим связь между индукцией электрического и магнитного полей и их напряженностями через частотно-зависимые компоненты тензоров диэлектрической и магнитной проницаемости материалов. В нашем моделировании материалы являются немагнитными (магнитная проницаемость $\mu = 1$) и изотропными, а соответствующие спектральные зависимости для компонент тензора диэлектрической проницаемости материалов описываются в рамках модели Друде–Лоренца (ДЛ). В модели ДЛ частотные зависимости комплексной проницаемости можно трансформировать в соответствующие дифференциальные уравнения во временном домене, используя свойства преобразования Фурье. В настоящее время модель ДЛ применительно к методу FDTD рассматривается как наиболее универсальная, позволяющая описывать как диэлектрики, так и проводники.

В нашем моделировании индивидуальные соединения ZnPc, C₇₀ и смесевой материал ZnPc:C₇₀ опи-

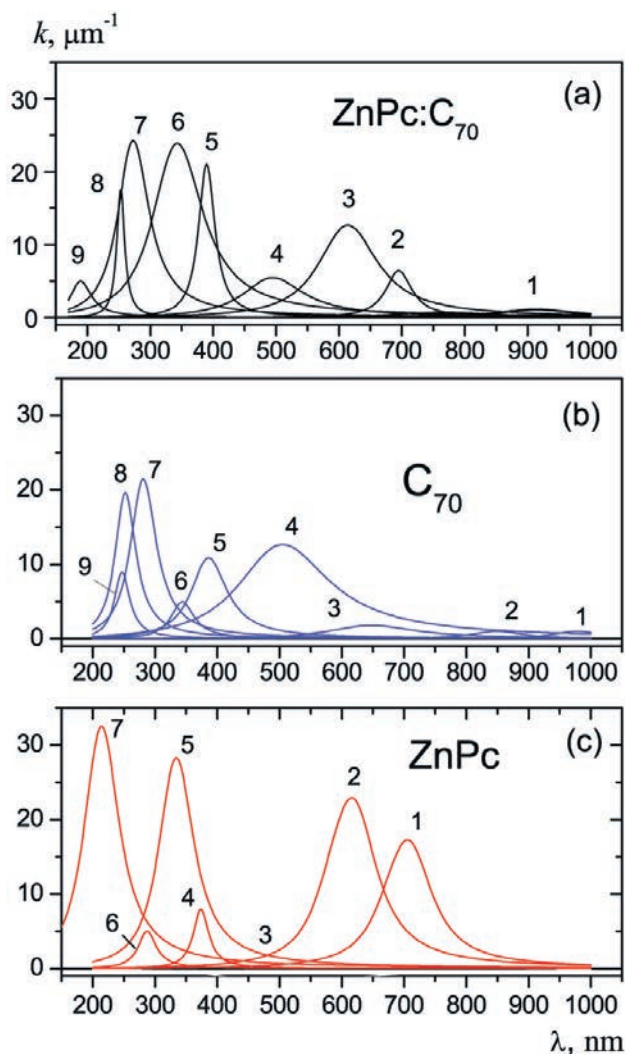


Рис. 2. Спектры резонансных полос поглощения лоренцевой формы: *a* — композиционного материала ZnPc:C₇₀, *b*, *c* — пленок индивидуальных соединений C₇₀, ZnPc соответственно. Для каждого материала полосы пронумерованы, а параметры полос приведены в таблице. Полоса №3 (*c*) с эффективным отрицательным поглощением, введенная для компенсации протяженных «крыльев» от лоренцианов, отмечена на графике лишь номером

сываются набором резонансных полос поглощения лоренцевой формы в спектральном диапазоне частот, соответствующем длинам волн 200–950 нм, где расположены основные полосы поглощения исследуемых материалов, (рис. 2). Как уже отмечалось выше, лоренцева форма удобна тем, что именно для нее могут быть записаны материальные уравнения во временном домене, что необходимо для решения уравнений Максвелла во времени. Однако лоренцева форма полос, являющаяся естественной для осцилляторов отдельных молекул, не всегда удобна для аппроксимации уширенных спектров в кристаллических и поликристаллических материалах.

Таблица. Параметры осцилляторов Лоренца пленок ZnPc, C₇₀, ZnPc:C₇₀, использованные при моделировании гибридных структур

Материал пленок	№	λ_m , нм	$\Delta\lambda_m$, нм	k , мкм ⁻¹
ZnPc	1	704	95.1	17
	2	615	95	23
	3	510	190	-2.7
	4	374	33.7	7.5
	5	334	65.5	28
	6	287	33	5
	7	214	64	33
C ₇₀	1	980	100	1
	2	850	100	1
	3	650	170	1.8
	4	505	167	13
	5	387	65	11
	6	344	45	4.8
	7	281	50	21
	8	250	40	20
	9	248	30	9
ZnPc:C ₇₀	1	915	150	1.1
	2	698	50	6.5
	3	613	110	13.2
	4	496	120	5.5
	5	390	30	21.4
	6	343	98	23.8
	7	273	60	24.4
	8	253	15	17.5
	9	189	30	5.2

В этих материалах контур поглощения определяется суммой вкладов от огромного количества молекулярных осцилляторов, каждый из которых имеет свой спектрально узкий резонанс, который из-за флуктуирующего локального кристаллического поля оказывается смещенным по частоте. Таким образом, в результате суперпозиции узких полос от множества осцилляторов получается уширенный контур поглощения, который часто трудно аппроксимировать единственным эффективным контуром лоренцевой формы. Кроме того, известно, что широкие лоренцианы характеризуются протяженными по частоте «крыльями», которые иногда приходится компенсировать дополнительными лоренцианами с отрицательным поглощением (например стро-

ка №3 в таблице для ZnPc). Тем не менее замена множества молекулярных осцилляторов одним или несколькими «эффективными» осцилляторами, на наш взгляд, допустима в силу линейности преобразования Фурье, а также в силу известного принципа Крамерса–Кронига, согласно которому спектр показателя преломления вне зависимости от способа аппроксимации этого поглощения в виде суперпозиции отдельных полос.

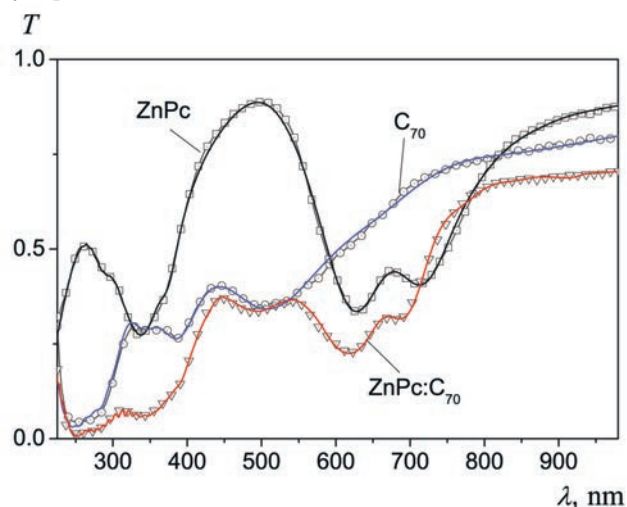


Рис. 3. Экспериментальные (линии с символами) и расчетные (сплошные линии) спектры коэффициентов пропускания (T) пленок ZnPc (50 нм), C₇₀ (70 нм) и ZnPc:C₇₀ (115 нм)

В данной работе параметры резонансных полос Лоренца в частотном диапазоне, представленные на шкале длин волн (λ_m — длина волны в максимуме поглощения осциллятора Лоренца, $\Delta\lambda_m$ — характерная спектральная ширина, k — коэффициент поглощения в максимуме в мкм⁻¹ (см. таблицу)), были подобраны так, чтобы рассчитанные методом FDTD спектры пропускания пленок ZnPc, C₇₀ и ZnPc:C₇₀ совпадали с измеренными спектрами пропускания этих пленок. На рис. 3 показаны рассчитанные методом FDTD спектры пропускания трех исследуемых пленок ZnPc, C₇₀ и ZnPc:C₇₀ и соответствующие экспериментальные спектры этих пленок, измеренные вне электродов исследуемых образцов.

Наряду с моделью ДЛ для органических материалов, нами были также созданы аналогичные модели для ИТО- и Al-электродов (рис. 4). В основу моделей этих материалов были положены экспериментальные зависимости их комплексной диэлектрической проницаемости из работ [32, 33].

В итоге для трех исследуемых образцов с пленками ZnPc, C₇₀ и ZnPc:C₇₀ нами были построены математические модели слоевых структур, включа-

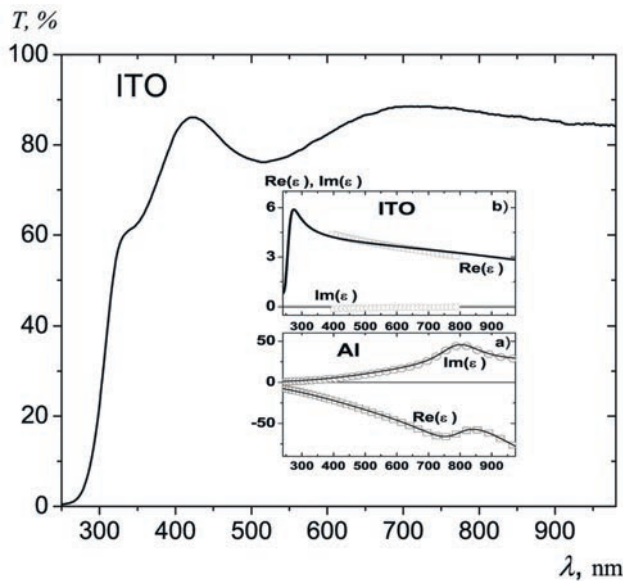


Рис. 4. Спектр пропускания ИТО-электрода толщиной (~ 100 нм) на кварцевой подложке. Вставки: спектральные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости алюминия Al (a) и ИТО-электрода (b), используемые в моделировании. Сплошные кривые — расчетные зависимости, квадраты и кружки — экспериментальные данные согласно [32, 33]

ющие электродные слои. Слойная структура образцов схематически показана на вставке рис. 1(b).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Численное моделирование позволило рассчитать, как спектры коэффициента пропускания (T), так и спектры коэффициента отражения (R) слоевых структур. Это, в свою очередь, позволило найти спектральные зависимости доли ($1-T-R$) падающего света, поглощенного в исследуемых структурах, и сопоставить спектры ампер-ваттной чувствительности S с найденным спектром поглощения света в этих структурах. На рис. 5a, b, c приводятся соответствующие спектры для трех исследуемых образцов с пленками ZnPc, C_{70} и ZnPc: C_{70} .

Из сравнения полученных модельных спектральных характеристик с экспериментальными зависимостями следует, что экспериментальные спектры фотоэлектрического отклика S (кривые 1 на рис. 5) лишь приблизительно коррелируют со спектрами доли поглощенного света ($1-T-R$) (кривые 2 на тех же рис.) для всех трех исследуемых материалов: ZnPc, C_{70} , ZnPc: C_{70} . Например, на рис. 5a можно видеть, что максимум фоточувствительности (кривая 1) на длине волны 555 нм соответствует ми-

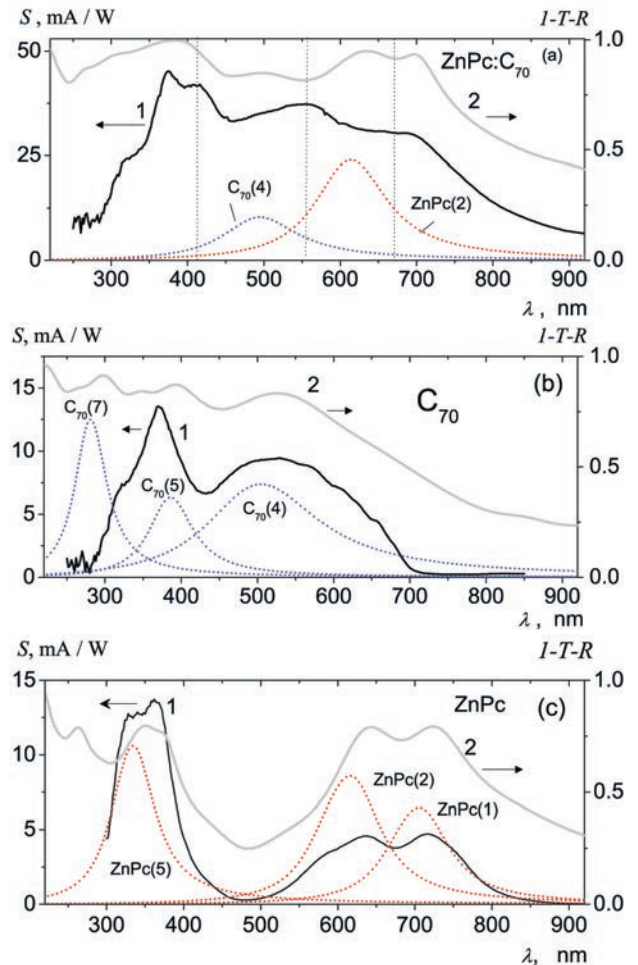


Рис. 5. Экспериментальные спектры ампер-ваттной чувствительности S (кривые 1) структур: ИТО–ZnPc: C_{70} –Al (a), ИТО– C_{70} –Al (b), ИТО–ZnPc–Al (c) и спектры доли поглощенного света ($1-T-R$) в соответствующих структурах (кривые 2)

нимуму поглощенной энергии в структуре (кривая 2). С другой стороны, этот максимум фоточувствительности соответствует существенному перекрытию четвертой полосы поглощения фуллерена C_{70} (4) и второй полосы фталоцианина цинка ZnPc(2). Эти две полосы специально выделены из всей структуры полос, показанной на рис. 2, и приведены на рис. 5a для демонстрации роли именно перекрытия полос. При этом очень важно, что фоточувствительность смеси композиции в этой области спектра примерно в 5 раз выше, чем фоточувствительность пленки из C_{70} , и в 15 раз выше, чем фоточувствительность пленки из ZnPc. Последнее указывает на то, что фоточувствительность смеси композиции обусловлена взаимодействием между молекулами C_{70} и ZnPc, которое, в свою очередь, определяется степенью перекрытия полос поглоще-

ния от донора ZnPc и акцептора C₇₀. При детальном анализе отмеченная особенность проявляется и в других областях спектра. Отметим также, что природа уширения полос поглощения фуллерена и фталоцианина цинка связана с их расщеплением в кристаллическом поле и образованием экситонных уровней [30]. Таким образом, именно экситонным взаимодействием двух акцепторно-донорных подсистем можно объяснить столь значительное увеличение фоточувствительности в смесевой композиции.

Если рассмотреть фотоэлектрический отклик пленок отдельных компонент C₇₀ (рис. 5b) и ZnPc (рис. 5c), то здесь можно наблюдать достаточно хорошую корреляцию фоточувствительности (кривые 1) с поглощенной энергией (кривые 2), но опять же с некоторым спектральным сдвигом по отношению к максимумам поглощения. Это также указывает на важную роль в фотоэффекте экситонных состояний, возникающих в результате расщепления основных электронных переходов. Например, максимум фоточувствительности фуллерена C₇₀ в видимой области спектра находится на длине волны 530 нм и сдвинут в длинноволновую область спектра по отношению к максимуму четвертой полосы поглощения C₇₀(4) на 505 нм (см. табл.). Кроме того, вплоть до 650 нм наблюдается более медленное уменьшение фоточувствительности с увеличением длины волны по сравнению с падением поглощения в данной полосе. Резкое падение фоточувствительности наблюдается на длинах волн свыше 700 нм, что, по-видимому, связано с верхним краем запрещенной зоны в поликристаллической пленке фуллерена. Отметим также, что отсутствие фотоэлектрического эффекта на длинах волн выше 700 нм, несмотря на существенное поглощение в алюминиевом электроде, говорит об отсутствии вкладов в фотоэлектрический эффект, связанных с фотоэлектронной эмиссией или пироэлектрическим эффектом. В УФ-спектральном диапазоне имеет место сильное поглощение в ИТО-электроде (рис. 4), который является первым и наиболее близким к источнику света поглощающим элементом оптической системы. Поглощение в ИТО приводит к тому, что экситонные состояния в УФ-области не могут возбуждаться, даже если они существуют, и наблюдается резкое падение фоточувствительности.

Сказанное выше в отношении фотоэлектрического эффекта в пленках C₇₀ в целом справедливо и в отношении пленок ZnPc (рис. 5c). Максимумы фотоэлектрического эффекта оказываются сдвинутыми по отношению к максимумам поглощения, что говорит об экситонной природе уширения полос погло-

щения. Например, в области второй полосы поглощения фталоцианина ZnPc(2) (максимум на 615 нм) наблюдаются два максимума фотоэлектрического эффекта примерно на длинах волн 580 и 640 нм. Наиболее длинноволновый максимум фоточувствительности на длине волны 720 нм также сдвинут по отношению к максимальному поглощению в пленке на 704 нм. Таким образом мы видим, что максимальный фотоэлектрический эффект как в случае пленок фуллерена, так и фталоцианина цинка возникает не на длинах волн максимального поглощения, а с некоторым спектральным сдвигом. Последнее, в свою очередь, можно связать со спектральным положением уровней экситонных состояний, которые оказываются сдвинутыми по отношению к спектральному положению максимумов поглощения.

В смесевой композиции фотоэлектрический эффект не является простой аддитивной функцией фоточувствительности индивидуальных соединений фталоцианина цинка и фуллерена. В пленках из смесевой композиции наблюдается резкое увеличение фотоэлектрического эффекта по сравнению с пленками индивидуальных соединений. При этом наблюдаемое усиление фотоэлектрического эффекта можно связать со степенью перекрытия полос поглощения донорных и акцепторных подсистем и, в особенности, с перекрытием резонансов экситонных состояний, которые сдвинуты по отношению к максимумам поглощения в индивидуальных соединениях (ZnPc и C₇₀).

На наш взгляд, перекрытие экситонных полос донорной ZnPc и акцепторной C₇₀ подсистем приводит к резонансному взаимодействию, которое проявляется не только в усилении фотоэлектрического эффекта, но в неаддитивных изменениях в самом спектре поглощения смесевой пленки в сравнении с пленками из индивидуальных соединений. Например, ZnPc : C₇₀ характеризуется интенсивной и широкой полосой поглощения №6 с максимумом на 343 нм (рис. 2a). В то же время C₇₀ имеет сравнительно слабую и узкую полосу поглощения №6 на близкой длине волны (344 нм), при этом в ZnPc максимум интенсивной полосы №5 расположен на 335 нм, т. е. сдвинут в коротковолновую область, а сама полоса более узкая (рис. 2b, c). Возникшую широкую и интенсивную полосу №6 с максимумом на 343 нм в смесевой композиции ZnPc : C₇₀ можно трактовать в терминах резонансного взаимодействия экситонных состояний двух подсистем: донорной ZnPc и акцепторной C₇₀. Аналогично можно трактовать уширение и коротковолновый сдвиг полосы №3 смесевой композиции ZnPc : C₇₀ в

сравнении с полосой №2 в пленке ZnPc.

Таким образом, имеются выраженные особенности в спектральном поведении оптических и фотоэлектрических характеристик композиционного материала ZnPc : C₇₀, отличные от соответствующих спектральных характеристик для индивидуальных соединений, входящих в эту смесь. Композицию.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально изучены спектральные особенности фотоэлектрической (ампер-ваттной) чувствительности образцов пленок на основе смеси донорно-акцепторной композиции ZnPc : C₇₀ фталоцианина цинка ZnPc и фуллерена C₇₀. Параллельно изучены и спектры фотоэлектрической чувствительности пленок из отдельных компонентов ZnPc и C₇₀. Установлено, что ампер-ваттная чувствительность пленки смеси композиции значительно превышает соответствующую чувствительность образцов пленок из отдельных компонентов.

С помощью методов численного моделирования построены математические модели слоев структур с пленками ZnPc, C₇₀ и ZnPc : C₇₀, заключенными между ИТО- и Al-электродами. В рамках модели Друде – Лоренца определены структуры полос поглощения в пленках ZnPc, C₇₀ и ZnPc : C₇₀, а также с учетом отражения света определены спектры поглощенной доли падающего на образцы излучения в широком спектральном диапазоне. Показано, что в случае ZnPc : C₇₀ максимумы фотоэлектрического эффекта сильно сдвинуты по отношению к максимумам резонансного поглощения и коррелируют с перекрытием резонансных полос поглощения для подсистем донора ZnPc и акцептора C₇₀. Именно резонансным взаимодействием, определяемым перекрытием полос экситонных состояний, объясняется резкое увеличение фотоэлектрического эффекта в пленках из смеси композиции ZnPc : C₇₀.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Peumans, S. Uchida, and S.R. Forrest, *Nature* **425**, 158 (2003).
2. H.-W. Lin, S.-Y. Ku, H.-C. Su et al., *Adv. Mater.* **17**, 2489 (2005).
3. A. J. Heeger, *Adv. Mater.* **26**, 10 (2014).
4. В. А. Миличко, А. С. Шалин, И. С. Мухин и др., *УФН* **186**, 801 (2016).
5. Y. Yuan, T. J. Reece, P. Sharma et al., *Nature Mater.* **11**, 296 (2011).
6. Y. Yuan, P. Sharma, Zh. Xiao et al., *Energy & Environ. Sci.* **5**, 8558 (2012).
7. В. А. Бендерский, Е. И. Кац, *ЖЭТФ* **154**, 662 (2018).
8. V. A. Benderskii and E. I. Kats, *High Energy Chem.* **52**, 400 (2018).
9. B. Kippelen and J.-L. Bredas, *Energy Environ. Sci.* **2**, 251 (2009).
10. K. Cnops, B. P. Rand, D. Cheyns et al., *Nat. Commun.* **5**, 3406 (2014).
11. K. J. Baeg, M. Binda, D. Natali et al., *Adv. Mater.* **25**, 4267 (2013).
12. E. Manna, T. Xiao, J. Shinaret et al., *Electronics* **4**, 688 (2015).
13. G. Yu, K. Pakbaz, and A. J. Heeger, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3422 (1994).
14. K. S. Nalwa, J. A. Carr, R. C. Mahadevapuram et al., *Energy & Environ. Sci.* **5**, 7042 (2012).
15. O. Hofmann, P. Miller, P. Sullivan et al., *Sens. Actuators B.* **106**, 878 (2005).
16. B. Kraabel, C. H. Lee, D. McBranch et al., *Chem. Phys. Lett.* **213**, 389 (1993).
17. K. Suemori, T. Miyata, T. Yokoyama et al., *Appl. Phys. Lett.* **86**, 063509 (2005).
18. F. Roth, C. Lupulescu, T. Arion et al., *J. Appl. Phys.* **115**, 033705 (2014).
19. Л. М. Блинов, В. В. Лазарев, С. Г. Юдин, *Кристаллография* **58**, 908 (2013).
20. C.-F. Lin, M. Zhang, S.-W. Liu et al., *Int. J. Mol. Sci.* **12**, 476 (2011).
21. G. Yu, J. Gao, J. C. Hummelen et al., *Science* **270**, 1789 (1995).
22. S. R. Cowan, N. Banerji, W. L. Leong et al., *Adv. Funct. Mater.* **22**, 1116 (2012).
23. D. Beljonne, J. Cornil, L. Mussioli et al., *Chem. Mater.* **23**, 591 (2011).
24. R.-J. Baeg, M. Binda, D. Natali et al., *Adv. Mater.* **25**, 4267 (2013).
25. Э. А. Силиньш, М. В. Курик, В. Чапек, *Электронные процессы в органических молекулярных кристаллах. Явления локализации и поляризации*. Зинатне, Рига (1988).

- 26.** <http://emlab.utep.edu/ee5390fdtd.htm>
- 27.** Хим. энцикл. в 5 т.; т. 5 Бол. Росс. Энцикл., Москва (1998), с. 195.
- 28.** A. B. P. Lever, S. R. Pickens, P. C. Minor et al., J. Am. Chem. Soc. **103**, 6800 (1981).
- 29.** К. В. Зуев, Дисс. канд. техн. наук, РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва (2019).
- 30.** С. П. Палто, А. В. Алпатова, А. Р. Гейвандов и др., Оптика и спектроскопия **124**, 210 (2018).
- 31.** В. В. Лазарев, Л. М. Блинов, С. Г. Юдин и др., ЖЭТФ **157**, 156 (2020).
- 32.** H. Fujiwara and M. Kondo, Phys. Rev. B. **71**, 075109 (2005).
- 33.** A. D. Rakić, A. B. Djurišić, J. M. Elazar et al., Appl. Opt. **37**, 5271 (1998).

ФОРМА СПЕКТРА И СВЕТОВОЙ СДВИГ РЕЗОНАНСА КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В ЯЧЕЙКАХ С АНТИРЕЛАКСАЦИОННЫМ ПОКРЫТИЕМ СТЕНОК В МОДЕЛЯХ ЗЕРКАЛЬНОГО И ДИФфуЗНОГО ОТРАЖЕНИЯ

К. А. Баранцев, Г. В. Волошин, А. С. Курапцев, А. Н. Литвинов, И. М. Соколов***

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 4 июля 2022 г.,
после переработки 4 июля 2022 г.
Принята к публикации 1 сентября 2022 г.

Рассмотрено влияние движения атомов в ячейке без буферного газа с антирелаксационным покрытием стенок на форму и сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей. Проведено сравнение двух типов отражения атомов от покрытия — упругого (зеркального) и диффузного, когда скорость атома после отражения определяется температурой стенки, — а также от качества антирелаксационного покрытия стенок. Показано, что для обоих типов отражения наблюдается немонотонная зависимость сдвига резонанса когерентного пленения населенности от размеров ячейки. При диффузном отражении сдвиг может менять знак, а в определенной области длин ячеек имеет место сложная двугорбая структура резонанса когерентного пленения населенностей. Проанализирована зависимость обнаруженных эффектов от ширины спектра лазерного излучения.

DOI: 10.31857/S0044451023020037
EDN: OPVINF

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление когерентного пленения населенностей (КПН) [1–4] (и родственного с ним эффекта электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) [5, 6]) представляет собой возникновение такого квантового суперпозиционного состояния, в которое переходит атомная система в результате взаимодействия с бихроматическим лазерным излучением, в котором это лазерное излучение перестает поглощаться. Характерной особенностью эффекта КПН является его резонансный характер, причем ширина резонанса может быть на несколько порядков меньше, чем естественная ширина линии оптического перехода. Это позволяет эффективно использовать явление КПН в таких областях, как оптическая магнитометрия [7–9], лазерная генерация без инверсии [10], квантовая информатика [11–13], стандартизация частоты [14–20].

При реализации эффекта КПН в ансамблях, находящихся в газовых ячейках, необходимо учиты-

вать, что атомы при столкновении со стенками ячейки деполяризуются, что приводит к уменьшению времени когерентного взаимодействия атомов с излучением. Одним из способов, позволяющим увеличить это время, является нанесение антирелаксационного покрытия на стенки ячейки [21]. Благодаря такому покрытию удается значительно повысить амплитуду КПН-резонанса и одновременно уменьшить его ширину. Это приводит к увеличению параметра качества резонанса КПН, что очень важно, например, для повышения точности квантовых стандартов частоты, основанных на явлении КПН.

В последнее время усилился интерес к использованию новых, ранее не исследованных типов покрытия. Так, например, в работе [22] сообщается об успешном использовании в качестве антирелаксационного покрытия такого вещества, как октадецилтрихлорсилан. Соединения алкинов также проявили себя хорошими кандидатами на роль антирелаксационного покрытия [23, 24]. С другой стороны, традиционно используемый парафин по-прежнему активно продолжает использоваться в качестве покрытия [25]. Достоинством парафинового покрытия, несомненно, является его доступность, технологическая простота изготовления, а также высокая

* E-mail: andrey.litvinov@mail.ru

** E-mail: ims@is12093.spb.edu

степень подавления деполяризации (1 акт деполяризации приблизительно на 10000 соударений) атомов при столкновении со стенкой ячейки [26]. Такие покрытия также характеризуются очень медленным «старением» [27], что очень важно при их длительном практическом использовании.

Явление КПН в ячейках с покрытием теоретически впервые исследовалось в работе [28]. Авторами использовалась модель зеркально-когерентного отражения атомов от стенок ячейки для трехуровневой Λ -схемы. В рамках этой же модели авторам работы [29] удалось теоретически предсказать сужение линии КПН-резонанса при зонной накачке. Этот эффект нашел экспериментальное подтверждение в работах [30, 31]. Подход, использовавший предположение о зеркально-когерентном отражении, был обобщен на случай многоуровневой атомной системы в работе [32] и позволил исследовать форму темных резонансов в атомарных парах ^{133}Cs . С другой стороны, в противоположность зеркально-когерентному отражению, существует модель полной термализации атомов при столкновении со стенками ячейки. Эта модель использована в работах [33, 34] при изучении эффекта КПН в атомарных парах щелочных металлов. Помимо теоретических работ, явление КПН, а также ЭИП в ячейках с покрытием, активно изучается в экспериментах. Для ячеек с покрытием были экспериментально исследованы [35, 36] резонансы ЭИП. Нелинейные магнитооптические резонансы в парах рубидия в ячейках с антирелаксационным стеночным покрытием рассматривались в работе [37].

Совместное влияние движения атомов и сверхтонкого расщепления на форму резонанса КПН в разреженном газе может приводить к новым физическим эффектам. Так, установлено [38], что в определенном диапазоне значений сверхтонкого расщепления возбужденного уровня возникает дополнительный пик, соответствующий КПН-резонансу на втором «нерезонансном» сверхтонком уровне. В работе [39] совместное влияние движения атомов и сверхтонкого расщепления было рассмотрено в ячейках конечного размера в модели зеркального отражения и для идеального покрытия. В рамках этого подхода авторами обнаружен целый ряд новых физических эффектов — сложная форма резонанса, появление дополнительных пиков, нетривиальная зависимость сдвига от размеров.

Целью настоящей работы является анализ влияния характера отражения атомов от антирелаксационного покрытия на сдвиг резонанса КПН и его форму. Мы проведем детальное сравнение предска-

заний двух моделей отражения атомов от покрытия: упругого (зеркального) и диффузного, когда атом адсорбируется на поверхности на достаточно длительное время и его скорость после «отражения» не зависит от начальной и определяется температурой стенки. Мы проанализируем также, как в каждом из этих предельных случаев на сдвиг влияет качество антирелаксационного покрытия стенок, т. е. вероятность релаксации внутреннего состояния атома при взаимодействии с ним. Наконец, мы исследуем зависимость сдвига от ширины спектра лазерного излучения, возбуждающего КПН-резонанс, что, по нашему мнению, представляет несомненный интерес при практическом использовании рассматриваемого эффекта.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Пусть на ансамбль щелочных атомов падает плоская электромагнитная волна с двумя несущими частотами, ω_1 и ω_2 . Будем полагать, что волновые векторы обеих спектральных компонент направлены вдоль оси z . Тогда напряженность электромагнитной волны может быть записана следующим образом:

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{e}_1 E_1 \exp\{-i(\omega_1 t - k_1 z)\} + \mathbf{e}_2 E_2 \exp\{-i(\omega_2 t - k_2 z)\} + \text{с.с.} \quad (1)$$

Здесь E_j , $\mathbf{e}_j$ и k_j — в общем случае комплексная амплитуда напряженности электрического поля, единичный вектор вдоль направления поляризации электрического поля и волновое число соответственно ($j = 1, 2$).

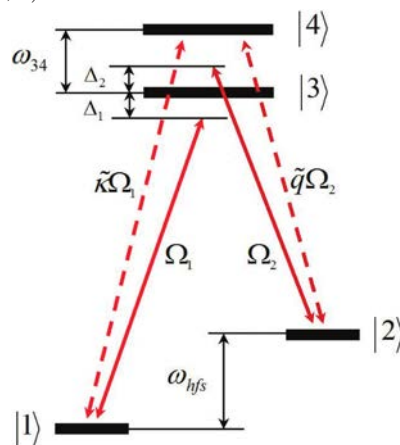


Рис. 1. Схема энергетических уровней активных атомов и возбуждаемые переходы

Анализ проведем в рамках четырехуровневой модели (рис. 1) атома, имеющего два основных ($|1\rangle$ и $|2\rangle$) и два возбужденных ($|3\rangle$ и $|4\rangle$) уровня. Частоты поля ω_1 и ω_2 близки к частотам переходов соответственно $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ и отличаются от них

на величину отстройки соответственно Δ_1 и Δ_2 ; λ_{hfs} и ω_{hfs} — длина волны и частота сверхтонкого перехода между уровнями основного состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (λ_{hfs} — длина волны, соответствующая ω_{hfs}), ω_{34} — частота перехода между уровнями возбужденного состояния $|3\rangle$ и $|4\rangle$.

Будем полагать, что атомный ансамбль разреженный и оптически тонкий и, следовательно, коллективные эффекты не оказывают существенного влияния на рассматриваемые в данной работе явления [40, 41]. Состояние ансамбля будем описывать с помощью одноатомной матрицы плотности $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, которая в представлении Вигнера по поступательным степеням свободы атома удовлетворяет следующему квантовому кинетическому уравнению:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla\right) \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)] + \hat{R}\{\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)\}, \quad (2)$$

где $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ — импульс атома, m и $\mathbf{v}$ — масса и скорость атома, $\hat{H}$ — гамильтониан атома, учитывающий взаимодействие с внешним полем, $\hat{R}$ — оператор релаксации.

Гамильтониан представим в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = \sum_{n=1}^4 \epsilon_n |n\rangle \langle n| \quad (3)$$

— гамильтониан системы в отсутствие поля, а $\hat{V}$ — оператор взаимодействия атомов с полем, который в дипольном приближении имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{V} = & -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} = \hbar\Omega_1 \exp\{-i(\omega_1 t - k_1 z)\} |3\rangle \langle 1| + \\ & + \hbar\Omega_2 \exp\{-i(\omega_2 t - k_2 z)\} |3\rangle \langle 2| + \\ & + \hbar\tilde{\kappa}\Omega_1 \exp\{-i(\omega_1 t - k_1 z)\} |4\rangle \langle 1| + \\ & + \hbar\tilde{q}\Omega_2 \exp\{-i(\omega_2 t - k_2 z)\} |4\rangle \langle 2| + \text{H.c.}, \quad (4) \end{aligned}$$

где $\Omega_j = E_j d_{3j}/\hbar$ ($j = 1, 2$), а $\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{e}_d \hat{d}$ — оператор вектора дипольного момента атомов. Коэффициенты $\tilde{\kappa} = d_{41}/d_{31}$, $\tilde{q} = d_{42}/d_{32}$ определяются как отношения матричных элементов дипольного момента; элементы матрицы дипольного момента $d_{12} = 0$ в силу того, что электродипольный переход $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ запрещен. В выражении (4) мы предположили, что поляризации падающих волн сонаправлены с вектором дипольного момента атомов ($\mathbf{e}_d \cdot \mathbf{e}_{1,2} = 1$).

В настоящей работе мы ограничимся одномерной моделью, рассматривая ячейку в виде плоского слоя толщиной a , расположенного перпендикулярно оси z . В этом случае матрица плотности будет зависеть только от проекции скорости атома на направление распространения излучения, т. е. от координаты z : $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \hat{\rho}(v, z, t)$, где $v \equiv v_z$. Среду, как

уже упоминалось, будем полагать оптически тонкой, поэтому поглощением излучения в ней можно пренебречь [42].

Выделим в недиагональных элементах матрицы плотности быстро осциллирующий множитель:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{ge} &= \rho_{ge} \exp\{-i(\omega_g t - k_g z)\}, \quad g = 1, 2, \quad e = 3, 4, \\ \tilde{\rho}_{12} &= \rho_{12} \exp\{-i(\omega_1 - \omega_2)t + i(k_1 - k_2)z\}, \end{aligned}$$

где $\rho_{nm}(v, z) = \langle n | \hat{\rho}(v, z) | m \rangle$, после чего воспользуемся приближением вращающейся волны. Тогда, пренебрегая малыми в рассматриваемом случае когерентностями ρ_{34} , получим систему уравнений для одноатомной матрицы плотности [38]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{11}}{\partial z} &= -i\Omega_1 \tilde{\rho}_{13} + i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{31} - i\tilde{\kappa}\Omega_1 \tilde{\rho}_{14} + i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \tilde{\rho}_{41} + \\ &+ \frac{\gamma}{2}(\rho_{33} + \tilde{\kappa}^2 \rho_{44}) + \Gamma_{||}(\rho_{22} - \rho_{11}), \\ \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{22}}{\partial z} &= -i\Omega_2 \tilde{\rho}_{23} + i\Omega_2^* \tilde{\rho}_{32} - i\tilde{q}\Omega_2 \tilde{\rho}_{24} + i\tilde{q}^* \Omega_2^* \tilde{\rho}_{42} + \\ &+ \frac{\gamma}{2}(\rho_{33} + \tilde{q}^2 \rho_{44}) + \Gamma_{||}(\rho_{11} - \rho_{22}), \\ \frac{\partial \rho_{33}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{33}}{\partial z} &= i\Omega_1 \tilde{\rho}_{13} - i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{31} + i\Omega_2 \tilde{\rho}_{23} - i\Omega_2^* \tilde{\rho}_{42} - \gamma \rho_{33}, \\ \frac{\partial \rho_{44}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{44}}{\partial z} &= i\tilde{\kappa}\Omega_1 \tilde{\rho}_{14} - i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \tilde{\rho}_{41} + i\tilde{q}\Omega_2 \tilde{\rho}_{24} - i\tilde{q}^* \Omega_2^* \tilde{\rho}_{32} - \\ &- \frac{\gamma}{2}(\tilde{\kappa}^2 + \tilde{q}^2) \rho_{44}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{12}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{\rho}_{12}}{\partial z} &= i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{32} - i\Omega_2 \tilde{\rho}_{13} + i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \tilde{\rho}_{42} - i\tilde{q}\Omega_2^* \tilde{\rho}_{14} + \\ &+ [i(\delta_R + (k_1 - k_2)v) - \Gamma_{12}] \tilde{\rho}_{12}, \quad (5) \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{13}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{\rho}_{13}}{\partial z} &= -i\Omega_1^* \rho_{11} - i\Omega_2 \tilde{\rho}_{12} + i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{33} + \\ &+ [-i(\Delta_1 - k_1 v) - \gamma'] \tilde{\rho}_{13}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{14}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{\rho}_{14}}{\partial z} &= -i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \rho_{11} - i\tilde{q}^* \Omega_2^* \tilde{\rho}_{12} + i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \rho_{44} + \\ &+ [-i(\Delta_1 - \omega_{34} - k_1 v) - \tilde{\kappa}^2 \gamma'] \tilde{\rho}_{14}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{23}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{\rho}_{23}}{\partial z} &= -i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{21} - i\Omega_2^* \rho_{22} + i\Omega_2^* \rho_{33} + \\ &+ [-i(\Delta_2 - k_2 v) - \gamma'] \tilde{\rho}_{23}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{24}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{\rho}_{24}}{\partial z} &= -i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \tilde{\rho}_{21} - i\tilde{q}^* \Omega_2^* \tilde{\rho}_{22} + i\tilde{q}^* \Omega_2^* \rho_{44} + \\ &+ [-i(\Delta_2 - \omega_{34} - k_2 v) - \tilde{q}^2 \gamma'] \tilde{\rho}_{24}. \end{aligned}$$

Здесь $\delta_R = (\Delta_1 - \Delta_2)/2$ — двухфотонная отстройка, γ — скорость спонтанного распада возбужденного состояния, γ' — скорость распада оптических когерентностей с уровня $|3\rangle$ ($\gamma' \approx \gamma/2$), $\Gamma_{||}$ — продольная скорость релаксации основного состояния, Γ_{12} — поперечная скорость релаксации основного состояния ($\Gamma_{12} \approx \Gamma_{||}/2$).

Система уравнений (5) должна решаться с использованием граничных условий для матрицы плотности. В настоящей работе будем рассматривать два типа граничных условий — это зеркально-когерентные граничные условия и граничные условия диффузного типа. Рассмотрим эти условия более подробно.

2.1. Граничные условия для зеркального отражения

Пусть отражение атома от стенок ячейки является упругим; процессы атомной деполаризации не зависят от скорости, с которой атом сталкивается со стенкой; при столкновениях, сопровождающихся деполаризацией, переходы между различными подуровнями основного состояния равновероятны. Тогда для элементов матрицы плотности можно записать следующие граничные условия [28, 32]:

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_{ii}(v'_z) - \rho_{ii}(0, v'_z) &= \beta(\bar{\rho}_{ii}(v_z) - \rho_{ii}(0, v_z)), \\ \rho_{ij}(0, v'_z) &= \alpha\rho_{ij}(0, v_z), \quad i \neq j, \\ \bar{\rho}_{ii}(v'_z) - \rho_{ii}(a, v'_z) &= \beta(\bar{\rho}_{ii}(v_z) - \rho_{ii}(a, v_z)), \\ \rho_{ij}(a, v'_z) &= \alpha\rho_{ij}(a, v_z), \quad i \neq j.\end{aligned}\quad (6)$$

Здесь $\bar{\rho}_{ii}(v)$ — населенность уровня в отсутствие возбуждающих полей. Коэффициенты α и β ($0 \leq \alpha, \beta \leq 1$) характеризуют степень сохранения поляризации населенностей ρ_{ii} и когерентностей ρ_{ij} , соответственно, в результате соударения атомов со стенкой.

Зеркально-когерентные граничные условия реализуются, когда $\alpha = 1$, $\beta = 1$.

2.2. Диффузные граничные условия

Пусть при взаимодействии атома со стенкой ячейки (налетающие на стенку атомы имеют неравновесную функцию распределения) потенциал взаимодействия атома с покрытием такой, что имеет место физическая адсорбция, т. е. атом захватывается стенкой ячейки, проводит на ней некоторое время [43], обменивается энергией, а затем вылетает с максвелловским распределением по скоростям [44]. Тогда потоки населенностей налетающих на стенку атомов ρ_{ij}^- на границах $z = 0$ и $z = a$ имеют соответственно вид

$$-\int_{-\infty}^0 \rho_{ii}(0, v_z) v_z dv_z, \quad (7)$$

$$\int_0^{\infty} \rho_{ii}(a, v_z) v_z dv_z. \quad (8)$$

Аналогичным образом записываются выражения и для когерентностей. Тогда атомы, вылетающие от стенки и описываемые потоком населенности ρ_{ij}^+ , будут иметь максвелловское распределение $M(v_z)$ по скоростям вне зависимости от их внутреннего состояния:

$$\rho_{ij}(0, v_z) = \frac{\rho_{ij}^+ M(v_z)}{a}, \quad v_z > 0, \quad (9)$$

$$\rho_{ij}(a, v_z) = \frac{\rho_{ij}^- M(v_z)}{a}, \quad v_z < 0. \quad (10)$$

Сшивая выражения (7) и (9) при $z = 0$ и (8) и (10) при $z = a$, получим окончательный вид граничных условий диффузного типа:

$$\begin{aligned}\rho_{ij}^+ \int_0^{\infty} \frac{M(v_z)}{a} v_z dv_z &= -\alpha \int_{-\infty}^0 \rho_{ij}(0, v_z) v_z dv_z, \\ \left[\rho_{ii}^+ - \frac{1-\beta}{N} \right] \int_0^{\infty} \frac{M(v_z)}{a} v_z dv_z &= \\ &= -\beta \int_{-\infty}^0 \rho_{ii}(0, v_z) v_z dv_z, \\ \rho_{ij}^- \int_{-\infty}^0 \frac{M(v_z)}{a} v_z dv_z &= -\alpha \int_0^{\infty} \rho_{ij}(a, v_z) v_z dv_z, \\ \left[\rho_{ii}^- - \frac{1-\beta}{N} \right] \int_{-\infty}^0 \frac{M(v_z)}{a} v_z dv_z &= \\ &= \beta \int_0^{\infty} \rho_{ii}(a, v_z) v_z dv_z, \quad i \neq j.\end{aligned}\quad (11)$$

Здесь $N = 2$ — число уровней основного состояния. В результате система дифференциальных уравнений (5) решается совместно с граничными условиями (6) или (11). В следующем разделе мы подробно обсудим результаты численного решения.

Основной характеристикой, представляющей интерес при исследовании КПН, является контраст резонанса. В рассматриваемых приближениях сигнал КПН пропорционален суммарной заселенности возбужденных состояний всех атомов, $\rho_{ex}(\delta_R)$, при заданной двухфотонной отстройке, т. е. формально получается интегрированием населенностей возбужденных состояний из (5) по скоростям и длине ячей-

ки. При этом контраст определяется следующим образом:

$$C(\delta_R) = 1 - \frac{\rho_{ex}(\delta_R)}{\rho_{ex}^N},$$

где ρ_{ex}^N — населенность возбужденного состояния в отсутствие двухфотонного резонанса, т. е. при больших двухфотонных отстройках.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА

Начнем рассмотрение численных результатов с анализа временной эволюции внутреннего состояния атома на каждом этапе его свободного пролета от стенки до стенки. При этом конечное состояние после удара о стенку является начальным для следующего этапа. В результате полная населенность возбужденных состояний всех атомов получается усреднением по их начальному однородному пространственному распределению и распределению Максвелла по скоростям. Динамика населенности отдельного атома для зеркально-когерентного и диффузного отражения в случае идеального покрытия ($\alpha = 1$, $\beta = 1$) представлена на рис. 2.

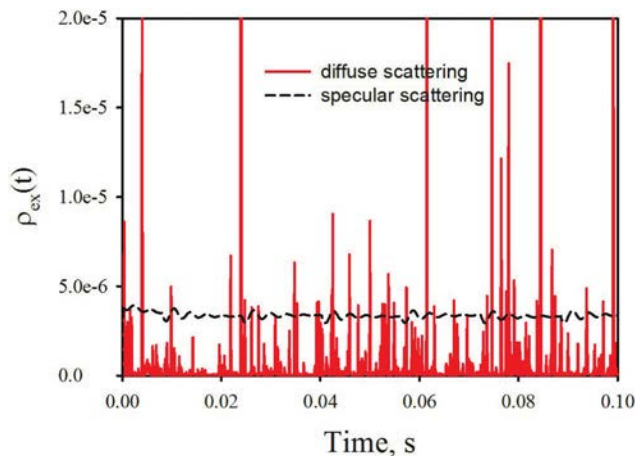


Рис. 2. Временная динамика заселенности возбужденного состояния атома при различных типах отражения. Начальное состояние — некогерентная суперпозиция нижних. Параметры расчета: $\Omega_1 = \Omega_2 = 2 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$; лазер узкополосный, $\omega_{34} = 400 \text{ МГц}$; $\Gamma_{12} = 10 \text{ Гц}$; $\gamma' = 6 \text{ МГц}$; $L = 10 \text{ см}$; $T = 50 \text{ °C}$; $v_z = 0.025 v_T$ (v_T — наиболее вероятная скорость). Шаг по времени 0.000125 с . Покрытие идеальное ($\alpha = 1$, $\beta = 1$).

На рис. 2 видно, что в случае диффузного отражения имеет место хаотичность, поскольку эволюция состояния отдельного атома случайна из-за случайного изменения величины скорости при соударении со стенкой. Как следует из граничных условий (11), скорость атома после такого столкновения с большой вероятностью становится соизмерима с наиболее вероятной скоростью. Поскольку

эта величина достаточно большая, а время пролета мало, равновесное внутреннее состояние атома не успевает установиться до следующего столкновения. При этом в атомном ансамбле в целом происходит «самоусреднение» по состоянию большого числа атомов. С другой стороны, для зеркального-когерентного типа отражения динамика полностью детерминирована [39], но при этом даже для идеального покрытия после изменения направления скорости начинаются переходные процессы установления «нового» равновесного состояния. Это вызвано изменением частоты внешних полей в системе отсчета, связанной с движущимся атомом. Для зеркально-когерентного отражения наблюдается периодичность в эволюции атомного состояния, что проявится в особенностях спектров КПН и сдвигов соответствующих резонансов. При этом периодичность зависит от скорости атома, размеров ячейки, интенсивности внешнего поля, скоростей спонтанного распада и др.

Различие в динамике отдельных атомов при разных типах отражения приводит к тому, что и форма резонанса КПН, и его сдвиг будут также различаться. Наиболее сильное влияние типа отражения имеет место в центре линии для ячеек малого размера. На рис. 3 проведено сравнение сдвигов абсолютного максимума контраста резонанса КПН для двух типов отражения для идеальных покрытий в зависимости от размеров L ячейки.

Как можно видеть из сравнения рис. 3а и 3б, частота расщепления возбужденного состояния существенно влияет на величины сдвигов резонанса КПН и их зависимость от размеров ячейки. Нетривиальным выглядит тот факт, что для диффузного отражения с увеличением ω_{34} среднее значение сдвига уменьшается, а амплитуда осцилляций для диффузного отражения растет (рис. 3а). Вторая особенность, присущая сдвигам КПН-резонанса при диффузионном отражении, — смена знака величины сдвига. При этом особенно важно подчеркнуть, что для малых ячеек, размеры которых существенно меньше длины волны микроволнового перехода ($L \ll \lambda_{hfs}$), сдвиг монотонно уменьшается с уменьшением размера.

Приведенные на рис. 3 результаты соответствуют положению максимума основного резонанса вблизи нулевых двухфотонных отстроек. Сложная немонотонная зависимость сдвига КПН-резонанса от размеров и наличие резких изменений при диффузном отражении связана со сложной формой контура резонанса КПН, обусловленной различным вкладом атомов,двигающихся в противоположных

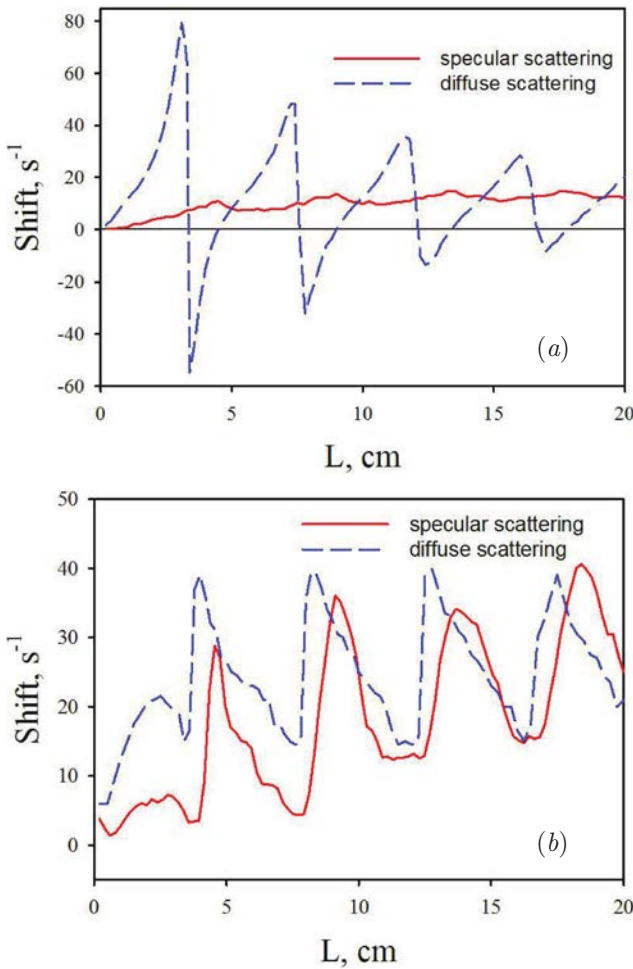


Рис. 3. Сдвиги положения абсолютного максимума контраста резонанса КПН в зависимости от размеров ячейки для двух типов отражения — зеркально-когерентного и диффузного. Расчеты проведены для следующих параметров: $\Omega_1 = \Omega_2 = 3 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$; $\lambda_{hfs} = 4.5 \text{ см}$; $T = 50^\circ \text{С}$; $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$; $\omega_{34} = 800 \text{ МГц}$ (a); $\omega_{34} = 400 \text{ МГц}$ (b). Остальные параметры те же, как на рис. 2. Покрытие идеальное ($\alpha = 1$, $\beta = 1$)

направлениях. На рис. 4 показаны спектры КПН-резонанса для диффузного (рис. 4a) и зеркально-когерентного отражения (рис. 4b). Размеры ячеек выбраны таким образом, чтобы они были близки к области первого резкого изменения знака сдвига.

Приведенный выше на рис. 2 результат получен для диффузного отражения. При зеркальном отражении ситуация иная. Когерентность разрушается не полностью, а скорость меняется только по направлению. Это создает условия для усиления механизма формирования дополнительных резонансов ЭИП, что хорошо демонстрирует рис. 3.

Диффузное отражение приводит к тому, что имеет место сложная структура спектра (рис. 4a). При $L = 3.1 \text{ см}$ ($0.69\lambda_{hfs}$) явным образом выде-

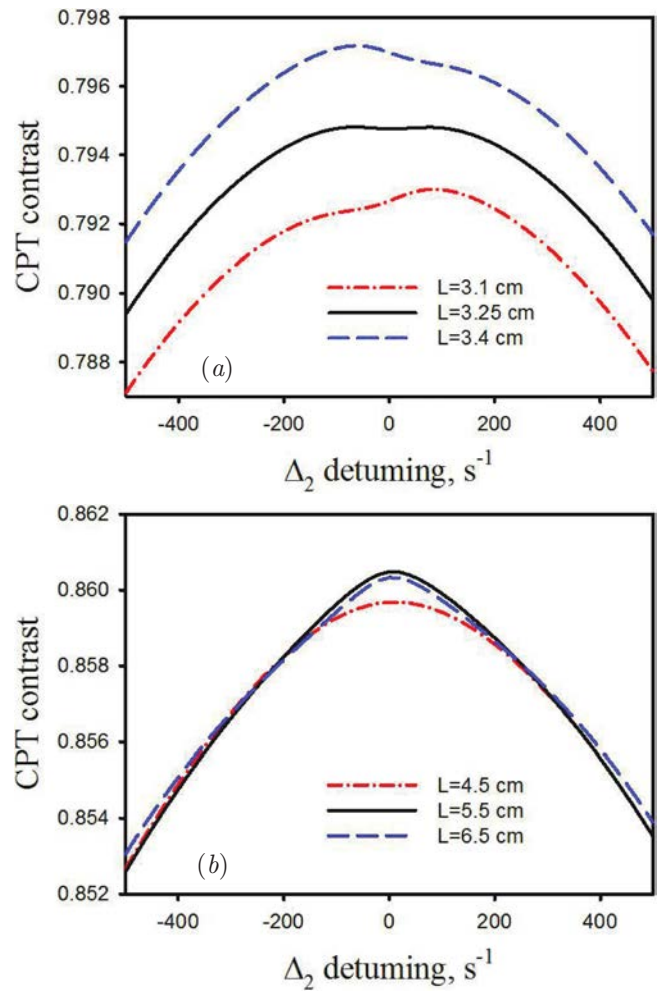


Рис. 4. Зависимости формы резонанса от размеров ячейки. Все параметры, как на рис. 3; $\omega_{34} = 800 \text{ МГц}$. Граничные условия диффузного (a) и зеркально-когерентного (b) типа

ляется максимум в области отрицательных отстройек, при $L = 3.4 \text{ см}$ ($0.75\lambda_{hfs}$) аналогичный максимум имеет место в области положительных отстройек. При $L = 3.25 \text{ см}$ ($0.72\lambda_{hfs}$) имеет место двугорбая структура. Кривые сдвига на рис. 4a получены при анализе положения абсолютного максимума резонанса, поэтому небольшие изменения размера ячейки для двугорбого резонанса могут приводить к резкому изменению положения абсолютного максимума, когда превалировать начинает либо правый, либо левый локальный максимум. Это мы и наблюдаем на графике зависимости сдвига от размера.

Для зеркально-когерентного отражения ситуация другая. Спектры более симметричны (рис. 4b), поэтому зависимость сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки более плавная.

При использовании явления КПН в задачах стабилизации частоты обычно проводят сканирование частоты вблизи резонанса. В связи с этим мы пола-

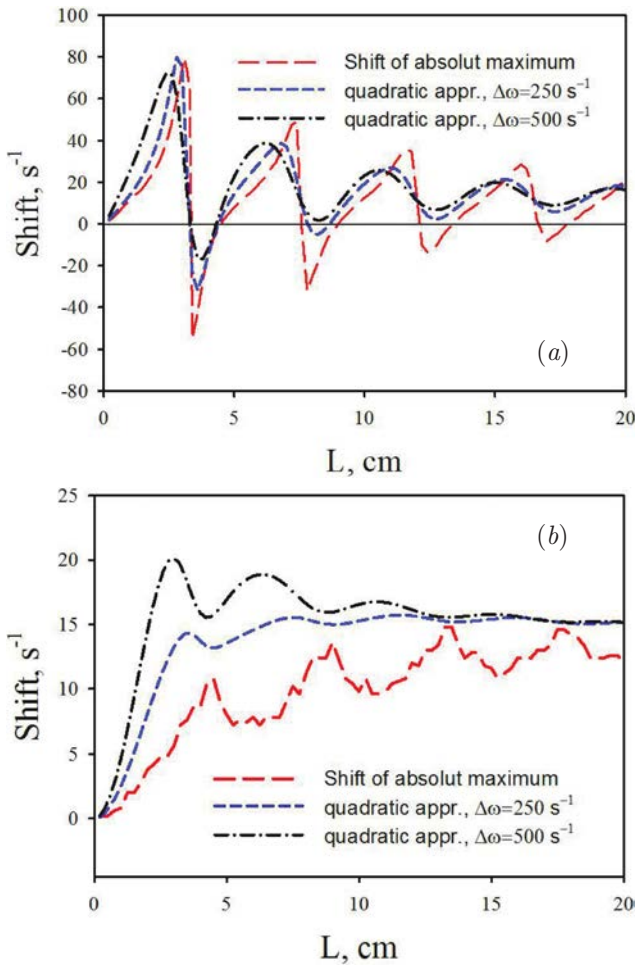


Рис. 5. Зависимости сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки. Все параметры, как на рис. 3, $\omega_{34} = 800$ МГц. Граничные условия диффузного (a) и зеркально-когерентного (b) типа

гаем целесообразным проанализировать то, как изменятся результаты в случае аппроксимации резонансной кривой вблизи максимума параболической зависимостью в определенной области частот $\Delta\omega$ вблизи нулевой двухфотонной отстройки. Параболическая аппроксимация выбрана для простоты, при этом она позволяет качественно наблюдать основные тенденции. Результаты сравнения для диффузного и зеркального отражения приведены на рис. 5.

Основной вывод, который следует из рис. 5, состоит в том, что определение сдвига на основе метода сглаживания кривой приводит к ослаблению осцилляций этого сдвига. Однако даже в этом случае амплитуда изменений величины сдвига остается существенной, также сохраняется знакопеременность этого сдвига при диффузном отражении. Вторым важным результатом касается абсолютной величины сдвига. И при диффузном, и при зеркальном

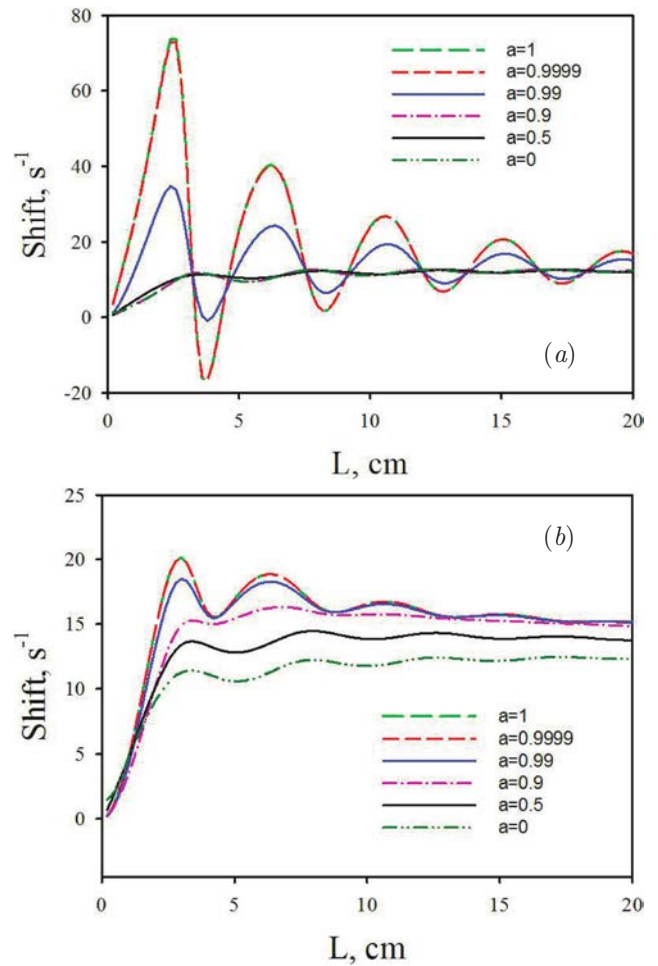


Рис. 6. Зависимости сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки. Все параметры, как на рис. 3, $\omega_{34} = 800$ МГц, диапазон частот $\Delta\omega = 500 s^{-1}$. Граничные условия диффузного (a) и зеркально-когерентного (b) типа

отражении для большинства размеров ячейки изменение сдвига по модуляционным измерениям дает большее значение, чем сдвиг абсолютного максимума резонанса. Особенно это заметно для зеркального отражения и для ячеек, размеры которых меньше или порядка половины длины волны радиочастотного перехода. По нашему мнению, это связано со сложной спектральной структурой КПН-резонанса для ячеек малого размера, обусловленной эффектом сужения Дике [28, 32, 45].

Рассмотрим теперь зависимость величины сдвига от качества покрытия (рис. 6). Будем изменять параметр α , при этом для простоты полагая, что $\alpha = \beta$. Это соответствует случаю, когда качество покрытия одинаково для населенностей и когерентностей.

На рис. 6 можно видеть, что ухудшение качества покрытия приводит к уменьшению абсолютной величины сдвига КПН-резонанса и его чув-

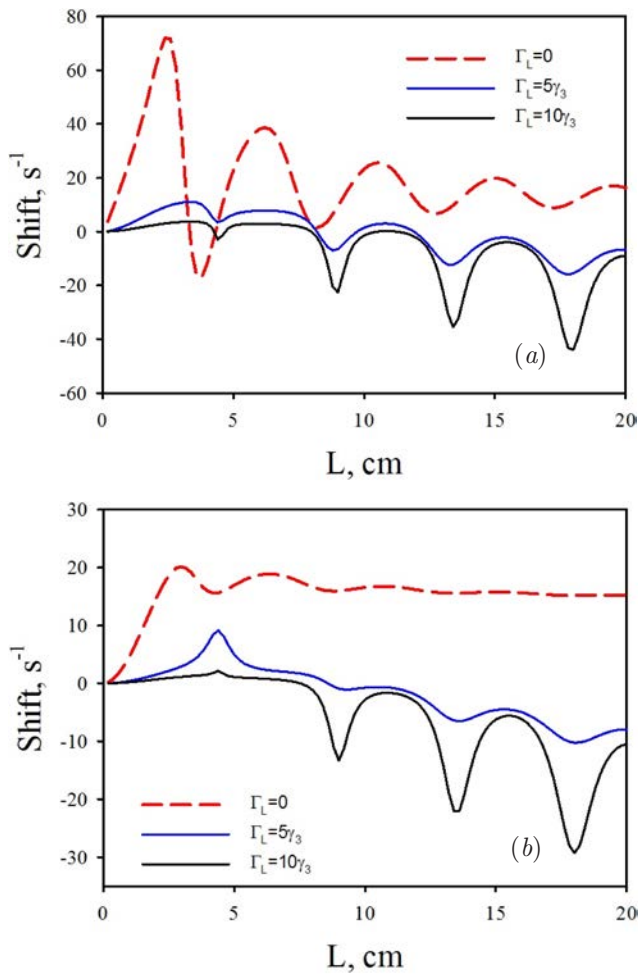


Рис. 7. Зависимости сдвига КПН-резонанса от ширины лазерного спектра. Все параметры, как на рис. 3, $\omega_{34} = 800$ МГц, $a = 1$ см. Граничные условия диффузного (a) и зеркально-когерентного (b) типа

ствительности от размеров ячейки (снижается амплитуда осцилляций). С ухудшением качества покрытия также уменьшается различие между диффузным и зеркально-когерентным типами покрытия. Это связано с тем, что по мере ухудшения покрытия начинают превалировать разрушение когерентности и выравнивание населенностей при каждом акте столкновения со стенкой ячейки. В итоге при $\alpha = \beta = 0$ мы получаем картину, соответствующую граничным условиям полного гашения.

Выше нами были рассмотрены зависимости сдвигов для узкополосного излучения. Сейчас мы рассмотрим случай, когда лазерное излучение является широкополосным. Под широкополосным излучением будем полагать случай, когда ширина лазерного спектра в несколько раз больше естественной ширины возбужденного состояния атомов. Как показано в работе [28], учет ширины лазерного спектра может быть проведен путем

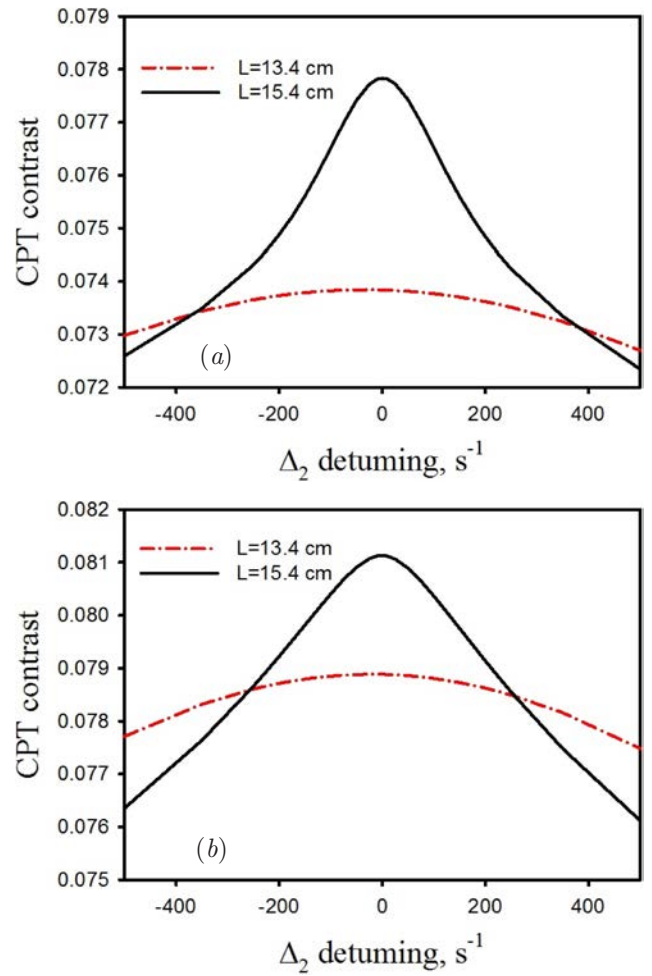


Рис. 8. Зависимости формы КПН-резонанса от размеров ячейки: $\omega_{34} = 800$ МГц; $\Gamma_L = 10\gamma$; остальные параметры, как на рис. 3. Граничные условия диффузного (a) и зеркально-когерентного (b) типа

соответствующей аддитивной добавки к скорости распада оптической когерентности γ' . На рис. 7 представлена зависимость сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки для различных ширин спектра лазерного излучения. Можно видеть, что, как и в случае узкополосного лазерного источника, имеет место квазипериодическая зависимость сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки. При этом амплитуда и средняя величина изменяются существенно.

Отмеченные качественные изменения величины сдвигов и их зависимостей от размеров связаны с особенностями спектров при широкополосном возбуждении КПН [28, 32]. На рис. 8 показаны спектры диффузионного и зеркального отражений для двух размеров ячейки. Один соответствует области «провала», т. е. области большого по величине отрицательного сдвига, второй — области, когда сдвиг близок к нулю.

Хорошо видно, что независимо от характера отражения малым сдвигам соответствует наличие в спектре сравнительно узкого пика вблизи резонансной частоты атома. Для тех размеров, для которых сдвиг велик, узкая структура отсутствует. Имеется один широкий максимум. Отметим также, что зависимости сдвигов и контраста резонанса КПН от качества покрытия для широкополосного лазерного возбуждения аналогичны случаю для узкополосного лазера. Различие состоит в абсолютной величине контраста, которая для широкополосного лазерного источника в несколько раз выше.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовано совместное влияние движения атомов и их столкновений с антирелаксационным покрытием стенок газовых ячеек на форму резонанса КПН и его сдвиг в разреженном газе. Показано, что в случае и узкополосного, и широкополосного лазерных источников при любом типе отражения атомов от стенок имеет место сложная немонотонная, осциллирующая зависимость сдвига КПН-резонанса от размеров ячейки. Амплитуды осцилляций уменьшаются при ухудшении качества покрытия. Обнаруженные эффекты объяснены особенностями спектров КПН-резонансов при различных условиях возбуждения. Обнаружено, что в рассматриваемых условиях наблюдается сильная зависимость формы спектров КПН от размеров ячейки. В ряде случаев резонансы имеют двугорбую структуру, причем форма спектра испытывает существенные изменения при сравнительно небольших изменениях размеров ячейки.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания (базовая часть), проект № FSEG-2020-0024. Проведение исследований формы спектра резонансов КПН было поддержано грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (<http://www.spbstu.ru>).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Alzetta, A. Gozzini, L. Moi, and G. Orriols, *Nuovo Cim. B* **36**, 5 (1976).
2. E. Arimondo and G. Orriols, *Lett. Nuovo Cim.* **17**, 333 (1976).
3. H. R. Gray, R. M. Whitley, and C. R. Stroud, Jr., *Opt. Lett.* **3**, 218 (1978).
4. Б. Д. Агапьев, М. Б. Горный, Б. Г. Матисов, Ю. В. Рождественский, *УФН* **163** (9), 1 (1993).
5. М. Б. Горный, Б. Г. Матисов, Ю. В. Рождественский, *ЖЭТФ* **68**, 728 (1989).
6. S. Harris, *Phys. Today* **50**, 36 (1997).
7. A. Akulshin, A. Celikov, and V. Velichansky, *Opt. Comm.* **84**, 139 (1991).
8. P. D. D. Schwindt, S. Knappe, Vishal Shah, L. Holberg, and J. Kitching, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 6409 (2004).
9. V. Andryushkov, D. Radnatarov, and S. Kobtsev, *Appl. Opt.* **61**, 3604 (2022).
10. О. А. Кочаровская, Я. И. Ханин, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 581 (1988).
11. M. D. Lukin, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 457 (2003).
12. M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 633 (2005).
13. R. Zhang and X.-B. Wang, *Phys. Rev. A* **94**, 063856 (2016).
14. J. Vanier, *Appl. Phys. B* **81**, 421 (2005).
15. С. А. Зибров, В. Л. Величанский, А. С. Зибров, А. В. Тайченачев, В. И. Юдин, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 534 (2005).
16. S. A. Zibrov, I. Novikova, D. F. Phillips, R. L. Walsworth, A. S. Zibrov, V. L. Velichansky, and V. I. Yudin, *Phys. Rev. A* **81**, 013833 (2010).
17. J. Kitching, *Appl. Phys. Rev.* **5**, 031302 (2018).
18. S. Kobtsev, S. Donchenko, S. Khripunov, D. Radnatarov, I. Blinov, and V. Palchikov, *Opt. Laser Technol.* **119**, 105634 (2019).
19. M. Gozzelino, S. Micalizio, C. E. Calosso, A. Godone, H. Lin, and F. Levi, *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelectr., Freq. Control* **68**, 872 (2021).
20. M. Petersen, M. A. Hafiz, E. de Clercq, and R. Boudot, *JOSA B* **39**, 910 (2022).
21. H. Robinson, E. Ensberg and H. T. Dehmelt, *Bull. Am. Phys. Soc.* **3**, 9 (1958).
22. S. J. Seltzer and M. V. Romalis, *J. Appl. Phys.* **106**, 114905 (2009).
23. M. V. Balabas, K. Jensen, W. Wasilewski, H. Krauter, L. S. Madsen, J. H. Müller, T. Fernholz, and E. S. Polzik, *Opt. Express* **18**, 5825 (2010).

24. M. V. Balabas, T. Karaulanov, M. P. Ledbetter, and D. Budker, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 070801 (2010).
25. S. N. Atutov, A. I. Plekhanov, V. A. Sorokin, S. N. Bagayev, M. N. Skvortsov, and A. V. Taichenachev, *Eur. Phys. J. D* **72**, 155 (2018).
26. M. T. Graf, D. F. Kimball, S. M. Rochester, K. Kerner, C. Wong, D. Budker, E. B. Alexandrov, and M. V. Balabas, *Phys. Rev. A* **72**, 023401 (2005).
27. D. Budker, L. Hollberg, D. F. Kimball, J. Kitching, S. Pustelny, and V. V. Yashchuk, *Phys. Rev. A* **71**, 012903 (2005).
28. G. Kazakov, B. Matisov, A. Litvinov, and I. Mazets., *J. Phys. B* **40**, 3851 (2007).
29. G. A. Kazakov, A. N. Litvinov, B. G. Matisov, V. I. Romanenko, L. P. Yatsenko, and A. V. Romanenko, *J. Phys. B* **44**, 235401 (2011).
30. S. Gateva, L. Gurdev, E. Alipieva, E. Taskova, and G. Todorov, *J. Phys. B* **44**(3), 035401 (2011).
31. H.-J. Lee and H.S. Moon, *J. Korean Phys. Soc.* **63**, 890 (2013).
32. K. A. Barantsev, S. V. Bozhokin, A. S. Kuraptsev, A. N. Litvinov, and I. M. Sokolov, *JOSA B* **38**, 1613 (2021).
33. K. Nasyrov, S. Gozzini, A. Lucchesini, C. Marinelli, S. Gateva, S. Cartaleva, and L. Marmugi, *Phys. Rev. A* **92**, 043803 (2015).
34. К. А. Насыров, *Автометрия* **52**, 85 (2016).
35. M. Bhattarai, V. Bharti, V. Natarajan, A. Sargsyan, and D. Sarkisyan, *Phys. Lett. A* **383**, 191 (2019).
36. E. Taskova and E. Alipieva, *J. Phys. Conf. Ser.* **1859**, 012025 (2021).
37. Е. А. Алипиева, Е. Т. Таскова, Г. Ц. Тодоров, В. А. Полищук, Т. А. Вартанян, *Опт. и спектр.* **127**, 373 (2019).
38. К. А. Баранцев, А. С. Курапцев, А. Н. Литвинов, *ЖЭТФ* **160**, 611 (2021).
39. А. Н. Литвинов, И. М. Соколов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 791 (2021).
40. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. A* **90**, 012511 (2014).
41. S. E. Skipetrov and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. B* **98**, 064207 (2018).
42. К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *ЖЭТФ* **148**, 869 (2015).
43. M. A. Bouchiat and J. Brossel, *Phys. Rev.* **147**, 41 (1966).
44. В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов*, Наука, Москва (1971).
45. R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **89**, 472 (1953).

КОЛЛЕКТИВНЫЕ И КВАЗИЛОКАЛЬНЫЕ МОДЫ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ ГЕКСАБОРИДОВ Yb_6 И YbB_6 С ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ

Н. Е. Случанко^{a}, Е. С. Жукова^b, Л. Н. Алябьева^b, Б. П. Горшун^b, А. В. Муратов^c,
Ю. А. Алещенко^c, А. Н. Азаревич^a, М. А. Анисимов^a, Н. Ю. Шицевалова^d,
С. Е. Половец^d, В. Б. Филипов^d*

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

^b *Центр фотоники и двумерных материалов, Московский физико-технический институт
(Государственный университет), 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

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

^d *Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича, Национальной академии наук Украины,
03142, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 10 августа 2022 г.,
после переработки 3 сентября 2022 г.
Принята к публикации 3 сентября 2022 г.

При комнатной температуре измерены широкодиапазонные спектры отражения гексаборидов YbB_6 и Yb_6 с ян-теллеровской неустойчивостью борного каркаса. Анализ оптической проводимости обнаруживает наряду с друдевской электронной составляющей сильно передемпфированные коллективные моды, которые в Yb_6 характеризуются большими диэлектрическими вкладами $\Delta\varepsilon=2000\text{--}5700$. Доля неравновесных носителей в гексабориде иттрия (Yb_6), находящемся на границе структурной неустойчивости ряда гексаборидов, достигает 85–90 %, тогда как в легированном полупроводнике — гексабориде иттербия (YbB_6) их концентрация не превышает 25 %. Показано, что в отличие от предсказаний модели топологического кондо-изолятора «металлизация» поверхности в Yb^{2+}B_6 может быть объяснена дополнительным легированием приповерхностного слоя ионами Yb^{3+} .

DOI: 10.31857/S0044451023020049
EDN: OQGWUY

1. ВВЕДЕНИЕ

Гексабориды (RB_6) редкоземельных (РЗ) и переходных металлов демонстрируют большое разнообразие физических свойств. Среди них имеются немагнитные металлы (например, LaB_6 с рекордными значениями параметров термоэмиссии [1, 2]), антиферромагнетики со сложной магнитной структурой (PrB_6 , NdB_6 , GdB_6 , TbB_6 , DyB_6 и HoB_6) [3–5], магнитная кондо-решетка CeB_6 [6], ферромагнитный полуметалл (EuB_6) [7], узкозонный полупроводник (YbB_6) [8], сверхпроводник (YB_6) [9] и топо-

логический кондо-изолятор (SmB_6) с промежуточной валентностью ионов Sm [10]. Столь разнообразное поведение определяется особенностями кристаллической структуры (слабосвязанное состояние тяжелого R -иона в полостях B_{24} жесткого ковалентного борного каркаса) и наличием нескольких одновременно активных взаимодействий, включая решеточные, орбитальные, зарядовые и спиновые степени свободы [11], что позволяет отнести RB_6 к системам с сильными электронными корреляциями (СКЭС). Недавно было обнаружено, что в высших бориде $\text{Gd}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$ развитие ян-теллеровской (ЯТ) неустойчивости в кластерах B_6 приводит к возникновению коллективных возбуждений в инфракрасном (ИК) диапазоне спектра, которые включают в себя ЯТ-моду, и кроме того, обуславливают

* E-mail: nes@lt.gpi.ru

квазилокальные колебания R -ионов, приводя к периодическому изменению (модуляции) электронной плотности в зоне проводимости [12, 13]. Было показано, что следствием коллективных возбуждений в RB_6 является переход значительной (более 70 % в LaB_6) доли электронов проводимости в неравновесное состояние (горячие носители) с сильным рассеянием [12, 13].

Для проверки влияния ЯТ-неустойчивости борного каркаса на свойства различных гексаборидов, включая полупроводники, представляет интерес выполнить измерения оптических спектров RB_6 с двух- и трехвалентными РЗ-ионами и провести сравнительный анализ вкладов в оптическую проводимость в этих СКЭС. С этой целью в работе при комнатной температуре исследованы спектры отражения монокристаллических образцов узкозонного полупроводника YbB_6 и сверхпроводника YB_6 , располагающегося на границе структурной неустойчивости ряда RB_6 .

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Высококачественные монокристаллы полупроводника YbB_6 с природным бором (18.9 % ^{10}B и 81.1 % ^{11}B), а также монокристаллические образцы сверхпроводника YB_6 с природным бором (температура сверхпроводящего перехода $T_c \approx 7.4 K$ [9]) и изотопически чистым бором (99.5 % ^{11}B , $T_c \approx 4.5 K$ [9]) были выращены методом вертикальной бестигельной индукционной зонной плавки в атмосфере аргона [14]. Для характеристики выращенных кристаллов использовались рентгеноструктурный, оптический спектральный анализ и микроанализ, а также были выполнены измерения сопротивления и эффекта Холла. Измерения коэффициента отражения в ИК-диапазоне проводились на кристаллах в форме дисков диаметром около 5 мм, методика подготовки образцов к измерениям подробно описана в [12, 13]. В диапазоне частот $\nu = 40\text{--}8000\text{ см}^{-1}$ спектры коэффициента отражения $R(\nu)$ измерялись с помощью ИК-фурье-спектрометра Vertex 80V с эталонными зеркалами, изготовленными напылением золота на стеклянную подложку. Ниже 20 см^{-1} коэффициент отражения YbB_6 был измерен на ЛОВ-спектрометре (ЛОВ — лампа обратной волны) [15]. Для измерений спектров оптической проводимости $\sigma(\nu)$ и диэлектрической проницаемости $\varepsilon'(\nu)$ в интервале $3700\text{--}35000\text{ см}^{-1}$ применялся эллипсометр Woollam V-VASE. Полученные по данным эллипсометрии коэффициенты отражения объединялись с измеренными ИК-спектрами. Данные [16] были

использованы для расширения спектрального диапазона примерно до 400000 см^{-1} . Проводимость на постоянном токе σ_{DC} и холловское сопротивление в магнитном поле $H = 3.4\text{ кЭ}$ измерялись стандартным 5-контактным методом на постоянном токе с коммутацией.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

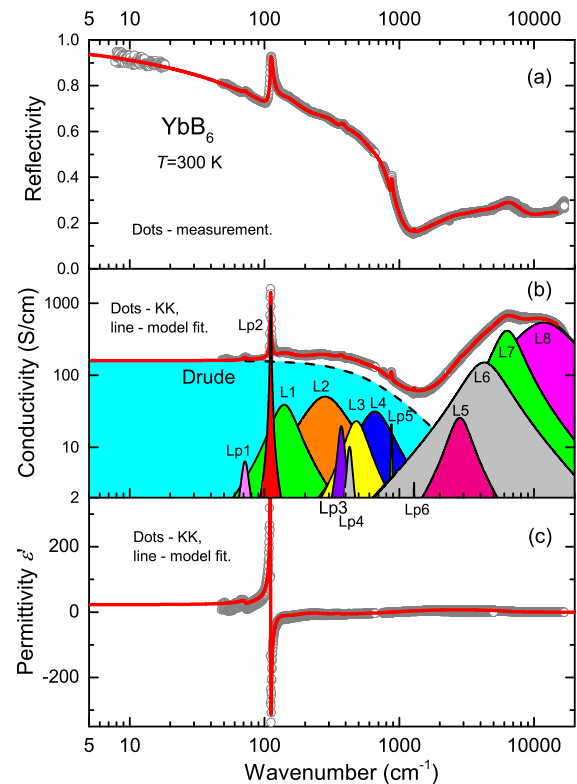


Рис. 1. (a) Спектр коэффициента отражения монокристалла YbB_6 (точки) и результат обработки спектра методом наименьших квадратов (линия) с использованием соотношения (1) для моделирования отклика свободных носителей заряда (Друде) и выражения (2) для коллективных возбуждений ($L1\text{--}L4$) в зоне проводимости. Соответствующие вклады в спектры динамической проводимости показаны отдельно на панели (b). Узкие линии $Lp1\text{--}Lp6$ отвечают фоновым особенностям. Спектр диэлектрической проницаемости представлен на панели (c). На панелях (b) и (c) точки соответствуют результату анализа спектра отражения с помощью соотношений Крамерса–Кронига (экстраполяция к нулевой частоте выполнена с помощью выражения Хагена–Рубенса с измеренной статической проводимостью; для высокочастотной экстраполяции использовалось выражение $R \sim \nu^{-4}$), а линиями показан результат его обработки по методу наименьших квадратов

На рис. 1a и рис. 2a, 2c точками показаны широкополосные спектры коэффициента отражения соответственно кристаллов YbB_6 и YB_6 . Особенности

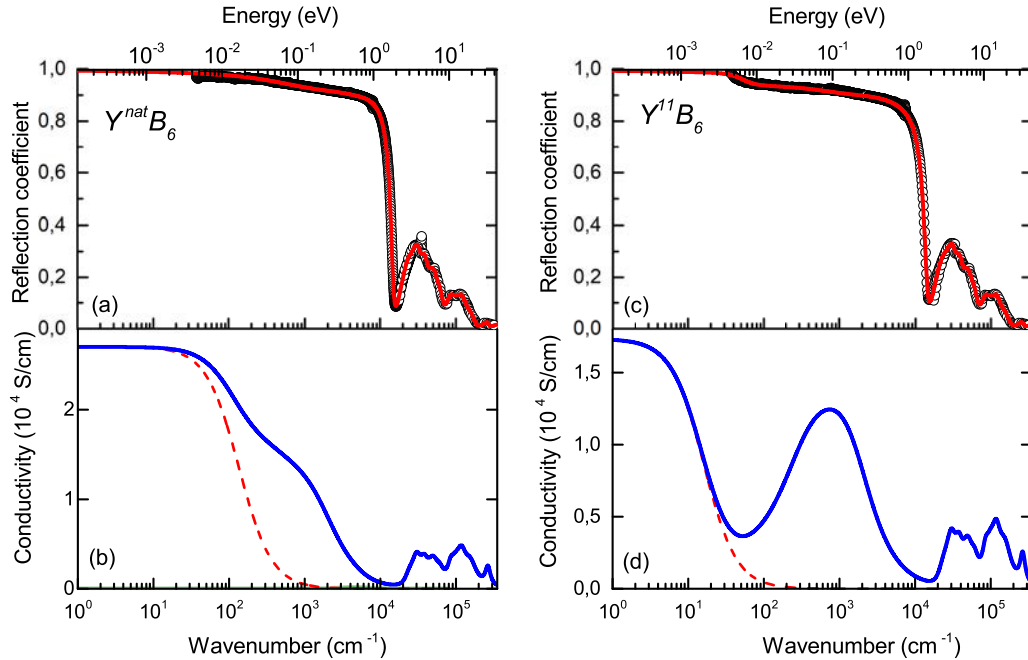


Рис. 2. Спектры коэффициента отражения (точки) гексаборида иттрия с природным $Y^{nat}B_6$ (a) и изотопически чистым бором $Y^{11}B_6$ (c) и результаты их обработки методом наименьших квадратов (линии) с использованием соотношения (1) для моделирования отклика свободных носителей заряда в рамках модели Друде (соответствующие вклады показаны штриховыми линиями на панелях b, d) и выражения (2) для набора коллективных возбуждений L1+L2+L3+L4

выше 1200 см^{-1} на рис. 1 и выше 20000 см^{-1} на рис. 2 обусловлены электронными межзонными переходами и ниже не обсуждаются. На более низких частотах спектры выглядят типично металлическими с плазменным минимумом при $\nu \approx 1200\text{ см}^{-1}$ (ширина зоны $\sim 150\text{ мэВ}$) в узкозонном легированном полупроводнике YbB_6 (рис. 1a) и $\nu \approx 17000\text{ см}^{-1}$ ($\sim 2.1\text{ эВ}$) в неравновесном металле YB_6 [9] (см. рис. 2a и 2c). Для анализа оптического отклика металлов обычно используется модель Друде с комплексной проводимостью:

$$\sigma_{Drude}^*(\nu) = \frac{\sigma_{DC}^{Drude}}{1 - i\nu/\gamma^{Drude}}, \quad (1)$$

где σ_{DC}^{Drude} — проводимость на постоянном токе, γ^{Drude} — скорость релаксации носителей заряда. Как видно на рис. 1, 2, спектры отражения YbB_6 и YB_6 не описываются соотношением (1); штриховыми линиями на рис. 1b, 2c, 2d показана наилучшая аппроксимация моделью Друде с измеренными в работе σ_{DC}^{Drude} и найденными значениями γ^{Drude} (см. табл. 1). Аналогично подходу, развитому в [12, 13] для $Gd_xLa_{1-x}B_6$, ИК-отклик всех трех исследованных кристаллов гексаборидов YbB_6 и YB_6 , описывался аддитивной суммой вкладов от свободных носителей заряда (1) и минимального набора коллективных возбуждений, обусловленных ко-

оперативной ЯТ-неустойчивостью в кластерах B_6 , необходимого для описания измеренных спектров отражения. Коллективные ЯТ-моды в спектрах RB_6 моделировались выражением Лоренца

$$\sigma^*(\nu) = \frac{0.5f\nu}{\nu\gamma + i(\nu_0^2 - \nu^2)}, \quad (2)$$

где ν_0 — резонансная частота, $f = \Delta\varepsilon\nu_0^2$ — сила осциллятора, $\Delta\varepsilon$ — диэлектрический вклад и γ — коэффициент затухания. Чтобы удовлетворительно аппроксимировать измеренные спектры отражения в интервале $\nu \leq 17000\text{ см}^{-1}$ для образцов YB_6 с металлической проводимостью оказывается достаточным ввести 3–4 лоренциана (см. вклады L1–L4 на рис. 3). В случае легированного полупроводника YbB_6 наряду с коллективными модами (L1–L4) в спектре отражения регистрируются также узкие фоновые особенности (см. Lp1–Lp6 на рис. 1a, 1b). Очевидно, что в отличие от металла YB_6 (ширина зоны проводимости $\sim 2.1\text{ эВ}$, см. рис. 2b, 2d), в полупроводнике YbB_6 колебательные состояния Lp1–Lp6 в спектрах хорошо разрешаются, поскольку они слабо экранируются электронами проводимости низкой концентрации (см. табл. 1 ниже). Таким образом, полученный результат свидетельствует о наличии в оптическом отклике кристаллов YbB_6 и YB_6 в интервале $100\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ ши-

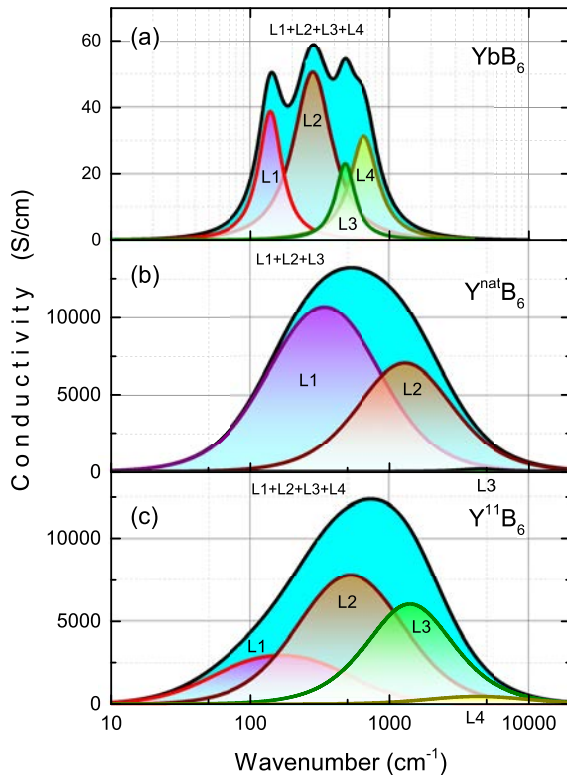


Рис. 3. Коллективные возбуждения (L1, L2, L3 и L4, показаны на панелях отдельно) в спектрах проводимости (a) полупроводника YbB_6 и металлов (b) $\text{Y}^{\text{nat}}\text{B}_6$ и (c) Y^{11}B_6 .

рокого пика ИК-поглощения, подобного обнаруженному в спектрах $\text{Gd}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$ [12, 13]. На рис. 1b и 2b, 2d представлены спектры оптической проводимости, полученные для исследованных кристаллов RB_6 . Отметим, что вклады (i) от свободных носителей (Друде) и (ii) широкого ИК-пика четко различаются, причем из двух кристаллов YB_6 пик $\sigma(\nu)$ проявляется наиболее отчетливо для Y^{11}B_6 , который по результатам [9] характеризуется наименьшим количеством стабилизирующих структуру вакансий Y и бора и является более неравновесным (см. рис. 2d).

На рис. 3 представлены вклады в спектры проводимости от коллективных возбуждений, полученные вычитанием друдеской составляющей. Отметим, что для исследуемых в работе кристаллов YB_6 спектральная форма пика хорошо воспроизводится при учете двух основных лоренцевских членов (см. рис. 2b и 2d), тогда как третье и четвертое более слабые слагаемые необходимы для описания нелоренцевской формы пика. Напротив, для описания суммарного вклада от коллективных возбуждений в полупроводнике YbB_6 требуется учет четырех лоренцианов (L1–L4 на рис. 1b и 3a), причем все составляющие достаточно надежно разрешаются в оптических спектрах. Как видно из срав-

нения рис. 3b и 3c, в Y^{11}B_6 коллективное возбуждение (L1+L2+L3+L4) расположено заметно выше по частоте по сравнению с $\text{Y}^{\text{nat}}\text{B}_6$, что в сочетании с уменьшенной амплитудой и интервалом низких частот, в котором регистрируется друдеский вклад, обеспечивает ярко выраженный характер пика в случае Y^{11}B_6 . Следует отметить, что в [9] было обнаружено значительное смещение особенностей на кривых теплоемкости $C(T)$ и производной удельного сопротивления $dp/dT(T)$ вверх по шкале температур в кристаллах Y^{11}B_6 по сравнению с $\text{Y}^{\text{nat}}\text{B}_6$, что соответствует взаимному расположению коллективных возбуждений в оптических спектрах (рис. 3). Указанное смещение было связано в [9] с развитием структурной неустойчивости вблизи границы диапазона существования RB_6 , приводя к значительным структурным искажениям в кристаллах Y^{11}B_6 с меньшей концентрацией вакансий и обуславливая также заметное подавление температуры сверхпроводящего перехода ($\Delta T_c \sim 3 \text{ K}$ [9]). Характеристики обеих компонент — (i) Друде (σ_{DC} и γ_{Drude}) и (ii) суммы лоренцианов L1–L4 (f — сила осциллятора, $\Delta\epsilon$ — диэлектрический вклад и γ_{peak} — параметр затухания), полученные при анализе в рамках соотношений (1), (2), представлены в табл. 1. В табл. 2 для YbB_6 приведены характеристики особенностей Lp1–Lp6 в спектрах $\sigma(\nu)$, отвечающих колебательным состояниям (см. рис. 1b). Видно, что коллективные возбуждения в YB_6 характеризуются большими диэлектрическими вкладами $\Delta\epsilon$ в диапазоне от $\Delta\epsilon \approx 2000$ (Y^{11}B_6) до $\Delta\epsilon \approx 5700$ ($\text{Y}^{\text{nat}}\text{B}_6$) и оказываются сильно пердемпфированными (относительные константы затухания $\gamma/\nu_0 = 2.5\text{--}4.2$). Указанные параметры сравнимы с наблюдавшимися в [12, 13] для гексаборидов $\text{Gd}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$, а также для додекаборидов LuB_{12} [17] и $\text{Tm}_{0.19}\text{Yb}_{0.81}\text{B}_{12}$ [18]. Значительно меньшие значения $\Delta\epsilon \sim 19$ и $\gamma/\nu_0 \sim 1.5$ реализуются в полупроводнике YbB_6 , что свидетельствует о существенной роли электронной компоненты в коллективной моде высших боридов (см. табл. 1).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные результаты рис. 1–3, по-видимому, свидетельствуют о том, что в высших боридах RB_6 и RB_{12} реализуется общий механизм, приводящий к возникновению в оптических спектрах этих СКЭС дополнительного вклада от коллективных возбуждений. При этом вследствие двукратного орбитального вырождения верхней занятой молекулярной орбитали молекулы B_6 являются ЯТ-активными,

Таблица 1. Параметры носителей заряда в модели Друде (см. (1)) и коллективного возбуждения (L1+L2+L3+L4, см. (2)) для монокристаллов YbB₆, Y¹¹B₆ и Y^{nat}B₆

	YbB ₆	Y ¹¹ B ₆	Y ^{nat} B ₆
σ_{DC}^{Drude} (Ом ⁻¹ см ⁻¹) (Гц)	160 (1.4 · 10 ¹³)	17331 (1.6 · 10 ¹⁶)	27027 (2.4 · 10 ¹⁶)
γ^{Drude} (см ⁻¹)	640	300	135
$(\nu_{pl}^{Drude})^2$ (10 ⁶ см ⁻²)	6.1	300	200
f_{peak} (10 ⁶ см ⁻²)	1.8	1670	1800
$\Delta\varepsilon_{peak}$	19	2015	5702
ν_{peak} (см ⁻¹)	~450	1100	530
γ_{peak} (см ⁻¹)	~670	2720	2250
γ_{peak}/ν_{peak}	~1.5	2.47	4.24
$f_{peak} + (\nu_{pl}^{Drude})^2$ (10 ⁶ см ⁻²)	7.9	1970	2000
n_{Hall} (10 ²² см ⁻³)	0.0025	1.12	1.4
n_{peak}/n_{total}	0.23	0.84	0.89
m^*/m_0	0.27	0.5	0.6
μ_{Hall} (см ² В ⁻¹ с ⁻¹)	47	10	12
μ_{Drude} (см ² В ⁻¹ с ⁻¹)	20	31	69

Таблица 2. Характеристики (ν — частота, $\Delta\varepsilon$ — диэлектрический вклад, γ — параметр затухания и f — сила осциллятора) особенностей Lp1 – Lp6 в ИК-спектрах полупроводника YbB₆, отвечающих колебательным состояниям (см. рис. 1b)

YbB ₆	Lp1	Lp2	Lp3	Lp4	Lp5	Lp6
ν (см ⁻¹)	72	111	371	428	873	1287
$\Delta\varepsilon$	0.75	9.6	0.36	0.14	0.03	0.0025
γ (см ⁻¹)	4.8	1.6	40	52	17	13
f (см ⁻²)	3.9 · 10 ³	1.2 · 10 ⁵	5 · 10 ⁴	2.6 · 10 ⁴	2.3 · 10 ⁴	4.1 · 10 ³

их структура лабильна относительно структурных ЯТ-искажений. В результате любые структурные дефекты (вакансии бора, беспорядок, обусловленный случайным распределением изотопов ^{10}B и ^{11}B в кластере B_6 , примеси и др.) приводят к снятию вырождения и понижению симметрии молекулы B_6 . В гексаборидах редкоземельных и переходных элементов с жестким ковалентным борным каркасом структурная ЯТ-неустойчивость кластеров B_6 резко усиливается, приводя к статическому и кооперативному динамическому эффектам Яна–Теллера, которые надежно регистрируются в структурных исследованиях, например, в GdB_6 [19]. Следствием кооперативного динамического эффекта Яна–Теллера является возникновение коллективных мод, с которыми оказывается связанной значительная часть носителей заряда в RB_6 . При этом в конденсированных фазах металлов и полупроводников RB_6 , наряду с плазменной частотой, которая, например, в неравновесном металле Yb_6 принимает значения $\nu_{pl} \approx 17000 \text{ см}^{-1}$ (около 2.1 эВ, см. рис. 2), появляется дополнительный масштаб энергий $\nu_{peak} \approx 450\text{--}1100 \text{ см}^{-1}$ (60–140 мэВ), отвечающий скоррелированным ян-теллеровским структурным искажениям (ferrodistortive effect) борного каркаса. Подчеркнем, что коллективные возбуждения, наблюдающиеся в оптических спектрах высших боридов, являются следствием кооперативного динамического ЯТ-эффекта, причем характерные частоты ν_{peak} оказываются непосредственно связанными с величиной расщепления верхних занятых молекулярных орбиталей кластеров B_6 .

Используя соотношения для плазменной частоты носителей заряда $\nu_{pl} = [ne^2/(\pi m^*)]^{1/2}$ (n — концентрация электронов, e — заряд) и силы осциллятора $f = \Delta\varepsilon\nu_0^2 = ne^2(\pi m^*)^{-1}$, для каждого из трех исследованных кристаллов было найдено отношение n/m^* и при сопоставлении с величиной холловской концентрации n_H была в грубом приближении оценена эффективная масса зонных носителей (см. табл. 1). Как следует из табл. 1, полученные значения $m^*(\text{Yb}_6) \sim 0.5\text{--}0.6m_0$ сравнимы с найденными в LaB_6 из измерений квантовых осцилляций [20], тогда как $m^*(\text{YbB}_6) \sim 0.27m_0$ оказывается несколько больше величины $0.2m_0$, оцененной в ARPES-экспериментах [21]. При этом очень малые значения холловской подвижности

$$\mu_{Hall} = \sigma_{DC} \cdot [e \cdot n_{Hall}] \approx 10\text{--}12 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$$

в Yb_6 подтверждают вывод о том, что это соединение располагается на границе абсолютной неустой-

чивости структурного ряда RB_6 [9]. Подвижность друдевской компоненты

$$\mu_{Drude} = [e \cdot 2\pi\gamma^{Drude}m^*]^{-1} \approx 30\text{--}70 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$$

в Yb_6 оказывается значительно (в 3–5 раз) больше общей холловской подвижности, что представляется естественным для системы с доминированием вклада неравновесных носителей заряда. Оценки доли носителей в неравновесной (n_{peak}) компоненте Yb_6 на уровне 85–90 % от полного числа электронов проводимости (см. табл. 1) свидетельствуют о развитии структурной/электронной неустойчивости в этом соединении, причем в соответствии с выводами [9] располагающееся ближе к стехиометрическому составу соединение Y^{11}B_6 характеризуется большей относительной концентрацией n_{peak}/n_{total} . Напротив, для легированного полупроводника YbB_6 холловская подвижность оказывается примерно в 2 раза выше, чем μ_{Drude} (см. табл. 1), что свидетельствует о сильном рассеянии носителей в друдевском канале (см. обсуждение ниже).

При обсуждении колебательных компонент Lp1 – Lp6 в спектрах $\sigma(\nu)$ YbB_6 отметим, что возбуждения на частотах 1225 см^{-1} (Lp6) и 866 см^{-1} (Lp5) наблюдались ранее соответственно в работах [22] и [23] и были отнесены к фононному ИК-поглощению в B_6 -кластерах. Пики на частотах 72 см^{-1} и 111 см^{-1} (рис. 1) следует связать с квазилокальными колебаниями, соответственно, ионов Yb^{3+} и Yb^{2+} в полостях B_{24} жесткого борного ковалентного каркаса (см., например, [23]). С учетом частотной зависимости глубины скин-слоя, меняющейся в интервале $70\text{--}115 \text{ см}^{-1}$ в пределах $\delta = 22\text{--}27 \text{ мкм}$, отношение силы осцилляторов $f(\text{Lp1})/(f(\text{Lp2}) + f(\text{Lp1}))$ (см. табл. 2) позволяет получить грубую оценку сверху $n(\text{Yb}^{3+}) \sim 2.5\%$ доли ионов Yb^{3+} в слое толщиной около δ вблизи поверхности кристаллов YbB_6 . В предположении о том, что носители в полупроводнике YbB_6 обусловлены легированием кристаллов Yb^{2+}B_6 ионами Yb^{3+} , оценки холловской концентрации n_{Hall}/n_{Yb} (табл. 2) приводят к значительно меньшей величине $n(\text{Yb}^{3+}) \sim 0.18\%$ (см. также [8]), что свидетельствует о появлении избыточной по сравнению с объемом кристаллов концентрации Yb^{3+} именно в приповерхностном слое. Такая «металлизация» приповерхностного слоя YbB_6 за счет его сильного по сравнению с объемом кристалла легирования ионами Yb^{3+} может служить объяснением, альтернативным модели коррелированного топологического кондо-изолятора [21], что подтверждается также выводом ARPES-исследований [24]

об отсутствии дираковского спектра в этом соединении. Отметим, что выбор подхода к описанию диэлектрического состояния в YbB_6 между моделями топологического кондо-изолятора, топологического изолятора d - p -типа [25] и обычного «зонного» изолятора активно обсуждался в [21, 25–27]. В частности, в [27] были выполнены эксперименты под давлением до 36 ГПа, которые позволили обнаружить переход полупроводник – полуметалл вблизи 14 ГПа и связать его с ростом концентрации ионов Yb^{3+} . Поскольку приповерхностный слой оказывается более структурно искаженным, можно предположить, что вблизи поверхности в кристаллах YbB_6 концентрация трехвалентного иттербия значительно превышает ее значения в объеме, обуславливая «металлизацию» поверхности в этом соединении. Нам представляется, что низкая по сравнению с холловской подвижность друдевских носителей в YbB_6 (см. табл. 1) связана с сильным рассеянием на деформационном потенциале в окрестности ионов Yb^{3+} , которые ответственны за легирование и формирование примесной полосы в этом узкозонном полупроводнике.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием инфракрасной фурье-спектроскопии и оптической эллипсометрии при комнатной температуре исследованы спектры отражения монокристаллов полупроводника YbB_6 и сверхпроводника YB_6 . Показано, что в этих гексаборидах наряду со спектральной компонентой Друде в оптической проводимости присутствуют широкие коллективные возбуждения с большими диэлектрическими вкладами, которые в случае YB_6 принимают значения $\Delta\epsilon = 2000$ –5700. Происхождение коллективных мод, включающих в себя в гексабориде иттрия до 90 % всех носителей заряда, связывается с кооперативным динамическим эффектом Яна – Теллера кластеров B_6 . Анализ фононных линий в спектрах YbB_6 вместе с результатами измерений эффекта Холла позволяет оценить концентрацию ионов Yb^{3+} в объеме и в приповерхностном слое кристалла в предположении легирования полупроводника Yb^{2+}B_6 этими ионами. По-видимому, «металлизация» приповерхностного слоя YbB_6 обусловлена структурными искажениями вблизи поверхности кристалла, благоприятствующими переходу иттербия в трехвалентное состояние.

Благодарности. Авторы признательны В. В. Глушкову за полезные дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования ФИАН им. П. Н. Лебедева при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№. ФСМГ-2021-0005).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Bakr, R. Kinjo, Y.W. Choi et al., Phys. Rev. Special Topics — Accelerators and Beams **14**, 060708 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.14.060708
2. M. Trenary, Sci. Tech. Adv. Mat. **13**, 023002 (2012).
3. Y. Onuki, A. Umezawa, W.K. Kwok et al., Phys. Rev. B **40**, 11195 (1989). DOI: 10.1103/PhysRevB.40.11195
4. M. Amara, S.E. Luca, R.M. Galera et al., Phys. Rev. B **72**, 064447 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.72.064447
5. K. Segawa, A. Tomita, K. Iwashita, et al., J. Magn. Magn. Mat. **104–107**, 1233 (1992). DOI: 10.1016/0304-8853(92)90563-4
6. A. S. Cameron, G. Friemel, and D. S. Inosov, Rep. Prog. Phys. **79**, 066502 (2016).
7. M. C. Aronson, J. L. Sarrao, Z. Fisk et al., Phys. Rev. B **59**, 4720 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevB.59.4720
8. V. V. Glushkov, A. D. Bozhko, A. V. Bogach et al., Phys. Stat. Sol. RRL **10**, 320 (2016).
9. N. Sluchanko, V. Glushkov, S. Demishev et al., Phys. Rev. B **96**, 144501 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.144501
10. D. J. Kim, J. Xia, and Z. Fisk, Nat. Mater. **13**, 466 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.106408
11. E. Dagotto, Science **309**, 257 (2005).
12. E. S. Zhukova, B. P. Gorshunov, G. A. Komandin et al., JETP Lett. **110**, 79 (2019).
13. E. S. Zhukova, B. P. Gorshunov, G. A. Komandin et al., Phys. Rev. B **100**, 104302 (2019)
14. H. Werheit, V. Filipov, N. Shitsevalova et al., J. Phys. Condens. Matter **24**, 385405 (2012). DOI: 10.1088/0953-8984/24/38/385405
15. Б. П. Горшунов, А. А. Волков, А. С. Прохоров, И. Е. Спектор. ФТТ **50**, 1921 (2008).
16. S.-I. Kimura, T. Nanba, S. Kunii, and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 3388 (1990). DOI: 10.1143/JPSJ.59.3388

- 17.** B. P. Gorshunov, E. S. Zhukova, G. A. Komandin et al., JETP Lett. **107**, 100 (2018). DOI: 10.1134/S0021364018020029
- 18.** N. E. Sluchanko, A. N. Azarevich, A. V. Bogach et al., J. Phys. Condens. Matter **31**, 065604 (2019). DOI: 10.1088/1361-648X/aaf44e
- 19.** N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina et al., Phys. Rev. B **100**, 205103 (2019).
- 20.** M. Hartstein, Hsu Liu, Yu-Te Hsu et al., Science **23**, 101632 (2020).
- 21.** M. Xia, J. Jiang, Z. R. Ye et al., Sci. Rep. **4**, 5999 (2014).
- 22.** Z. Yahia, S. Turrell, J. Turrell and J. P. Mercurio, J. Molecular Struct. **224**, 303 (1990).
- 23.** S.-I. Kimura, T. Nanba, S. Kunii, and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 371 (1992).
- 24.** E. Franzeskakis, N. de Jong, J. X. Zhang et al., Phys. Rev. B **90**, 235116 (2014).
- 25.** Tay-Rong Chang, Tanmoy Das, Peng-Jen Chen et al., Phys. Rev. B **91**, 155151 (2015).
- 26.** Chang-Jong Kang, J. D. Denlinger, J. W. Allen, et al., Phys. Rev. Lett. **116**, 116401 (2016).
- 27.** Yazhou Zhou, Dae-Jeong Kim, Priscila F. S. Rosa et al., Phys. Rev. B **92**, 241118 (2015).

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНТАКТОВ ДЖОЗЕФСОНА Pb_{0.6}In_{0.4} / KFe₂As₂ И KFe₂As₂ / KFe₂As₂. ПРОВЕРКА СИММЕТРИИ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

М. В. Голубков^{a,b*}, В. А. Степанов^a, А. В. Садаков^a, А. С. Усольцев^a, И. В. Морозов^c

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

^b Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС"
119049, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 27 июня 2022 г.,
после переработки 21 октября 2022 г.
Принята к публикации 21 октября 2022 г.

Изучены характеристики точечных контактов Джозефсона Pb_{0.6}In_{0.4} / KFe₂As₂ и KFe₂As₂ / KFe₂As₂. Измерены зависимости характерного напряжения контактов от температуры $V_C(T)$ и зависимости амплитуд первых ступенек тока на вольт-амперных характеристиках от мощности электромагнитного излучения с частотой 7.6 ГГц. Установлено, что зависимости $V_C(T)$ для всех контактов можно описать моделью SIS*IS-контакта (S — сверхпроводник, I — изолятор, S^* — сверхпроводник с меньшей критической температурой) для сверхпроводников с s -симметрией параметра порядка. Доказано, что период осцилляций ступенек тока в зависимости от мощности СВЧ-излучения можно точно аппроксимировать резистивной моделью контакта с $I_S = I_C \sin(\varphi)$. Полученные результаты согласуются с обычной s -симметрией параметра порядка в KFe₂As₂.

DOI: 10.31857/S0044451023020050

EDN: OQHRUY

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхпроводники на основе железа (Ferrum Base Superconductors — FeBS) [1] до сих пор вызывают огромный интерес. Это связано с большим разнообразием структур и свойств этих соединений, многозонностью электронной системы, высокой критической температурой, неизвестным спаривающим взаимодействием [2]. Теоретические исследования показали, что вероятным спаривающим взаимодействием в FeBS являются спиновые флуктуации, которые приводят к $s^\pm$ -симметрии параметра порядка (ПП) [3]. Одним из методов изучения симметрии ПП является эффект Джозефсона, заключающийся в протекании сверхпроводящего тока I_S через так называемую слабую связь между двумя сверхпроводя-

щими электродами, например, тонкий ($< 30 \text{ \AA}$) слой изолятора или «нормального» металла или мостик с размерами порядка длины когерентности. Как известно, ток пар I_S в контакте Джозефсона (КД) между «обычными» сверхпроводниками пропорционален синусу разности фаз ПП $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ в сверхпроводниках, образующих контакт $I_S = I_C \sin(\varphi)$ (I_C — критический ток контакта) [4]. Если хотя бы один из сверхпроводников КД является многозонным, то джозефсоновские токи, текущие в разные зоны, должны зависеть и от фаз ПП в этих зонах [5]. При $s^\pm$ -симметрии ПП это приводит к вычитанию токов, текущих в противоположных направлениях в зоны с s^+ - и s^- -симметриями, уменьшению I_S , характерного напряжения КД $V_C = I_C R_N$, изменению зависимости V_C от температуры и пропорциональности $I_S \sim \sin(2\varphi)$ [5–10]. Последнее, в свою очередь, изменяет зависимость I_C от магнитного поля и период осцилляций критического тока и ступенек тока на вольт-амперных характеристиках (ВАХ) КД от мощности внешнего электромагнитного (СВЧ) из-

* E-mail: golubkov@lebedev.ru

лучения [5–10]. Таким образом, величина V_C , зависимость $V_C(T)$, период осцилляций критического тока и ступенек тока на ВАХ могут служить критериями для определения симметрии ПП в электродах КД.

К настоящему времени опубликовано около десятка экспериментальных исследований пленочных и точечных КД с электродами из разных FeBS [11–24]. Все изученные КД имели заметные отличия от «классических»: V_C порядка нескольких десятков мкВ вместо $\Delta/e \sim 1$ мВ (Δ — энергетическая щель сверхпроводника, e — заряд электрона) и нестандартные зависимости $V_C(T)$. В то же время качественная (точная в [23, 24]) аппроксимация зависимости периода осцилляций I_C и ступенек тока в магнитном и СВЧ-полях показала, что I_S пропорционален $\sin(\varphi)$. Отклонение от этой зависимости наблюдалось только в работе [19]. К сожалению, величина V_C в несколько десятков мкВ не является весомым доказательством $s^\pm$ -симметрии ПП в FeBS-электроде, так как КД с V_C примерно такой же величины были получены и на планарных ниобиевых контактах [25–28]. Качественная аппроксимация периода осцилляций [19] также вызывает много вопросов.

В теоретических работах, как правило, многозонная сверхпроводимость изучалась в «чистых» системах. В реальных кристаллах FeBS присутствует заметное рассеяние электронов. Включение рассеяния как на магнитных, так и немагнитных примесях в теоретический анализ показало, что эти эффекты убивают нестандартное спаривание ($s^\pm$ -симметрия ПП преобразуется в обычную s). В «грязных» сверхпроводниках $s^\pm$ -симметрия ПП может сохраниться только на части фазовой диаграммы [29]. Это указывает на актуальность исследований наиболее «чистых» сверхпроводников для определения характеристик ПП.

В большом семействе многозонных FeBS простой структурой, низким рассеянием на примесях и дефектах обладают относящиеся к 122-семейству монокристаллы KFe_2As_2 с $T_C = 3.8$ К, шириной перехода $\Delta T_C = 0.3$ К, удельным сопротивлением $\rho_{ab} < 1$ мОм · см и отношением $\rho(300\text{К})/\rho(4\text{К})$ до 3000 [30]. Рост кристаллов, кристаллическая структура, фазовая диаграмма, транспортные свойства, характеристики электронной структуры KFe_2As_2 к настоящему времени тщательно изучены [30–36]. Расчеты и измерения зонной структуры [37–40] подтвердили отсутствие электронных карманов на поверхности Ферми, что не препятствует $s^\pm$ -симметрии ПП [40], и сильные электронные кор-

реляции. Проведено изучение энергетической щели методами ЯМР/ЯКР, измерения теплоёмкости [41–44], глубины проникновения магнитного поля [45], туннельной спектроскопии [46] и ARPES [47]. Показано [46], что плотность состояний на уровне Ферми определяется сингулярностью Ван Хофа, что, в свою очередь, приводит к конечной плотности состояний внутри энергетической щели при $T < T_C$. При изучении электрон-бозонного взаимодействия методом точно-контактной спектроскопии в нормальном состоянии обнаружен пик в области энергий 20 мэВ, природа которого обсуждается в [48].

Полученные результаты указывают на необычный характер сверхпроводящего состояния KFe_2As_2 , трёхзонную сильную дырочную сверхпроводимость с отличной от стандартной s - или d -симметрией ПП в зонах с величинами энергетических щелей $\Delta_\alpha \approx 1.0, 0.4$ и 0.15 мэВ (α — номер зоны) и линиями узлов на внутренней, средней и внешней поверхностях Ферми [47]. Фазы ПП в зонах и механизм, ответственный за спаривающее взаимодействие, неизвестны. Эффект Джозефсона в КД с KFe_2As_2 ранее не исследовался.

В настоящей работе проведены исследования сверхпроводящего тока точечных контактов (ТК) Джозефсона между обычным сверхпроводником $\text{Pb}_{0.6}\text{In}_{0.4}$ ($T_C \approx 6.6$ К) и монокристаллами KFe_2As_2 с ($T_C = 3.6$ – 4.6 К) и между кусочками одного монокристалла KFe_2As_2 , сломанного в жидком гелии с целью определения симметрии параметра порядка KFe_2As_2 . Нами изучены вольт-амперные характеристики контактов, измерены зависимости критических токов КД от температуры $V_C(T)$ в диапазоне (1.8–4.6) К и зависимости критических токов и амплитуд ступенек тока I_n ($n = 0, 1, 2$; $I_0 = I_C$) на ВАХ от мощности СВЧ-излучения частотой $f = 7.6$ ГГц при $T \approx 1.8$ К.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА.

Монокристаллы KFe_2As_2 были выращены из KAs-флюса по технологии, близкой к описанной в работе [36], с небольшой добавкой бария в исходную шихту. После вскрытия тигля флюс с кристаллов удалялся механически с последующим отмыванием в водно-спиртовом растворе и скалыванием. Монокристаллы имели форму пластин черного цвета с металлическим блеском и были достаточно стабильны на воздухе. Структура и состав выросших монокристаллов изучались с помощью рентгеновской дифракции и рентгеноспектрального микроанализа на оборудовании, описанном в работе [49].

Исследования структуры выросших монокристаллов показало, что они имеют тетрагональную кристаллическую решетку типа ThCr_2Si_2 с пространственной группой симметрии $I4/mmm$, типичную для KFe_2As_2 [36]. Средний элементный состав кристаллов определялся по множеству точек и менялся в пределах $\text{KFe}_{1.99}\text{As}_{1.91} - \text{KFe}_{2.07}\text{As}_{1.97}$. Наличие в выросших кристаллах Ва с концентрацией до 0.3 % привело к вариациям температуры начала перехода изученных образцов в сверхпроводящее состояние T_C^{onset} в диапазоне (3.6–4.6) К. Опубликованные работы утверждают, что легирование Ва в диапазоне 0–10 % приводит к изменению только амплитуд и анизотропий энергетических щелей в зонах, не влияя на их симметрии [50, 51], что не критично для наших исследований.

Для создания джозефсоновских ТК использовались лучшие монокристаллические пластинки с размерами до $1 \times 0.5 \times (0.01-0.02) \text{ мм}^3$, полученные раскалыванием выросших кристаллов, с минимальной шириной перехода в сверхпроводящее состояние и максимальной величиной $RRR = R(290 \text{ К})/R(4.2 \text{ К})$. Магнитная восприимчивость кристаллов $\chi(T)$ измерялась на переменном токе с частотой 96 кГц. Магнитное поле, направленное перпендикулярно поверхности пластинки, не превышало 0.5 Э. Зависимости электрического сопротивления кристаллов от температуры в диапазоне (1.8–300) К измерялись на постоянном токе (0.1–1) мА, текущем в плоскости ab кристалла, стандартным четырехконтактным методом [19, 23, 24]. Электрические контакты к образцам с сопротивлением (0.1–0.3) Ом были сделаны с помощью индия. На рис. 1 показаны температурные зависимости продольного сопротивления $R_{ab}(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ одного из образцов KFe_2As_2 . Температура середины перехода $T_C(50\%)$ и ширина перехода $\Delta T_C(10\%-90\%)$, измеренные по зависимости $\chi(T)$, составляли соответственно 3.9 К и 0.3 К. Отношение сопротивлений при комнатной и гелиевой температурах $RRR = R(290 \text{ К})/R(4.2 \text{ К}) = 700$. Для разных образцов отношение RRR лежало в диапазоне 370–800, значение $\Delta T_C(10\%-90\%)$ не превышало 0.5 К, что говорит об их хорошем качестве.

Все измерения проводились в изготовленной нами криогенной вставке в транспортный гелиевый дьюар, позволяющей делать измерения при T до 1.8 К в СВЧ-поле при минимальном расходе жидкого гелия. Описание методов создания ТК Джозефсона типа «игла-наковальня» (needle anvil, NA) и приборов, использованных в экспериментальной установке, приведены в работах [23, 24, 52]. В ка-

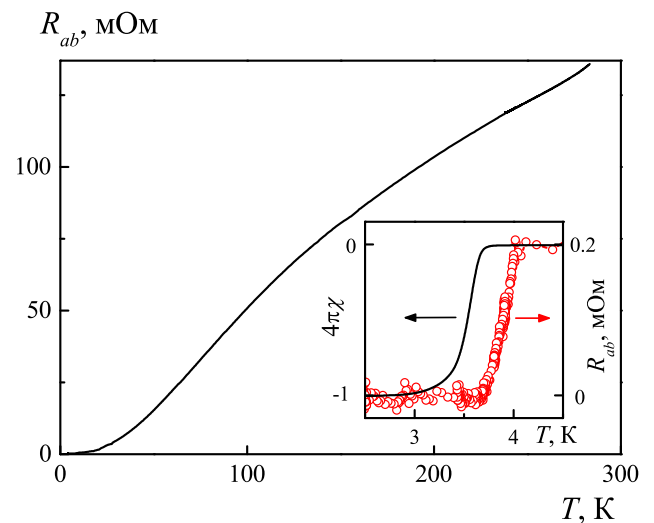


Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления $R_{ab}(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ одного из образцов KFe_2As_2 : $RRR = R(300 \text{ К})/R(4 \text{ К}) = 700$, $T_C(50\%) = 3.9 \text{ К}$, $\Delta T_C(10\%-90\%) = 0.3 \text{ К}$

честве «иглы» мы использовали обычный БКШ-сверхпроводник $\text{Pb}_{0.6}\text{In}_{0.4}$ с $T_C = 6.8 \text{ К}$ [53]. Накопательной служило тонкое ребро пластинки KFe_2As_2 . Площадь касания электродов ТК была порядка толщины ребра кристалла.

Точечные контакты на микротрещине (break-junction, BJ) также неоднократно использовались нами [54]. Для создания BJ-контакта пластина KFe_2As_2 зажималась четырьмя индиевыми контактами на пружинящем основании из спаянных пластин бериллиевой бронзы (толщина 0.4 мм) и фольгированного стеклотекстолита (толщина 0.5 мм). В центре кристалла делалась прорезь, служившая концентратором напряжений. При изгибе основания с помощью дифференциального винта кристалл трескался в районе прорези. Характеристики ТК настраивались путём изменения давления. Разламывание кристалла, касание электродов и настройка ТК проводились при $T \approx 1.8 \text{ К}$ и токе (10–100) мкА.

При первом касании электродов сопротивление ТК, как правило, составляло несколько Ом, сверхпроводящий ток через контакт отсутствовал из-за возможных окислов на поверхностях. При увеличении давления между электродами сопротивление ТК уменьшалось, появлялся сверхпроводящий ток и I_C . Величина I_C увеличивалась с ростом давления. Джозефсоновская природа сверхтока I_S проверялась по появлению ступенек тока на вольт-амперной характеристике ТК и по полноте подавления критического тока I_C СВЧ-излучением.

После настройки и стабилизации ТК проводилась запись серии ВАХ при $T = (1.8\text{--}1.9)\text{ К}$ при увеличении мощности СВЧ-излучения P на контакте. Мощность увеличивалась до появления признаков нагрева ТК, приводящего к росту сопротивления, видимого на ВАХ. После этого устанавливалась $P = 0$ (ослабление = 100 дБ) и проводилась запись контрольной ВАХ. Совпадение первой в серии и контрольной ВАХ позволяло сделать вывод о стабильности ТК. Для дальнейшей обработки использовались ВАХ только стабильных контактов. Если характеристики ТК не изменялись при записи в СВЧ-поле, то на этом же ТК проводилась запись серии ВАХ при повышении температуры до немного превышающей T_C . После этого температура понижалась до первоначальной и для оценки стабильности ТК вновь записывалась контрольная ВАХ. Из серий ВАХ, записанных при разных температурах и мощности СВЧ, извлекались зависимости $V_C(T)$ и зависимости критического тока и амплитуд ступенек тока I_n ($n = 0, 1, 2$; $I_0 = I_C$) от $\sqrt{P}$. Измеренные зависимости $V_C(T)$ аппроксимировались вычисленными по формулам теории [47]. Нормированные на критический ток при $P = 0$ зависимости

$$i_n^{exp}(\sqrt{P}) = I_n(\sqrt{P})/I_C(P = 0)$$

аппроксимировались вычисленными из RSJ-модели контакта Джозефсона $i_n^{calc}(i_{ac})$ (i_{ac} — переменный ток в КД, наведенный СВЧ-излучением, нормированный на I_C) [4, 19, 23, 24].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

Обычно НА- и ВJ-контакты настраивались на $I_C = (0.3\text{--}1.5)\text{ мА}$. Такой критический ток оказался оптимальным для наших измерений. При меньшем токе падала амплитуда и увеличивалось «размытие» I_C и ступенек тока. При большем токе у нас не доставало мощности источника СВЧ для полного подавления I_C . При включении генератора СВЧ-излучения критический ток ТК I_C уменьшался и на ВАХ при напряжениях $V_n = n\hbar\omega_{ac}/2e$ ($n = 1, 2, 3, \dots$, $\omega_{ac} = 2\pi f$) появлялись ступеньки тока I_n , отвечающие гармоникам частоты СВЧ-сигнала. Отметим, что при мощности СВЧ близкой к максимальной наблюдался рост сопротивления ТК, связанный с нагревом.

На рис. 2 показаны ВАХ одного из наших ТК, записанные при нескольких уровнях мощности P , СВЧ и метод определения I_C и R_N , аналогичный использованному в работах [11–24]. Все ВАХ записывались от минимального отрицательного тока к

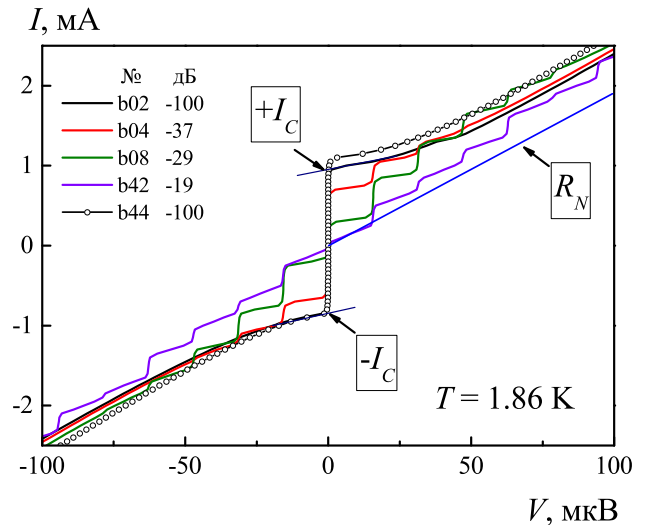


Рис. 2. Несколько вольт-амперных характеристик НА-контакта Джозефсона, записанных при $T = 1.86\text{ К}$ и разных уровнях мощности СВЧ-излучения. Указаны номера ВАХ и ослабление мощности в децибелах. Хорошо видно изменение критического тока и амплитуд первых ступенек тока контакта с ростом мощности. Для ВАХ b02 показано определение критических токов $+I_C$, $-I_C$ и R_N : $+I_C = 0.95\text{ мА}$, $R_N = 0.053\text{ Ом}$, $V_C = 50\text{ мВ}$. Первая ступенька тока появлялась при напряжении $V_1 = 15.7\text{ мВ}$. Величина ступенек тока I_n при воздействии СВЧ определялась аналогично I_C . Первая b02 и последняя ВАХ b44, записанные до и после окончания измерений в СВЧ-поле ($P = -100\text{ дБ}$), имеют минимальные различия, демонстрируя стабильность ТК

максимальному положительному. В подписи к рис. 2 приведены основные характеристики контакта I_C , R_N и V_C , найденные по ВАХ при $P = 0$. Запись ВАХ при больших токах и, соответственно, больших V оказалась невозможной из-за нагрева ТК. Форма ВАХ как НА-, так и ВJ-контактов могла быть как гиперболической (ВАХ b02 рис. 2), характерной для RSJ-модели, так и заметно отличающейся от гиперболы (ВАХ a32 рис. 3). На всех ВАХ I_C и ступеньки тока имели заметные амплитуды, которые изменялись при изменении мощности СВЧ. На ВАХ отсутствовали скачки тока или напряжения, связанные с появлением квантов магнитного потока в контакте. Это означает, что характерный размер контактов, определяемый по размеру проводящих ток областей электродов, был меньше джозефсоновской глубины проникновения магнитного поля [55, 56]. Отметим, что критический ток частично подавлен шумами (ВАХ вблизи I_C слегка размыты), а найденная величина R_N , по-видимому, также отличалась от реального сопротивления контакта в «нормальном» состоянии [23, 24]. Видно, что ветви ВАХ при

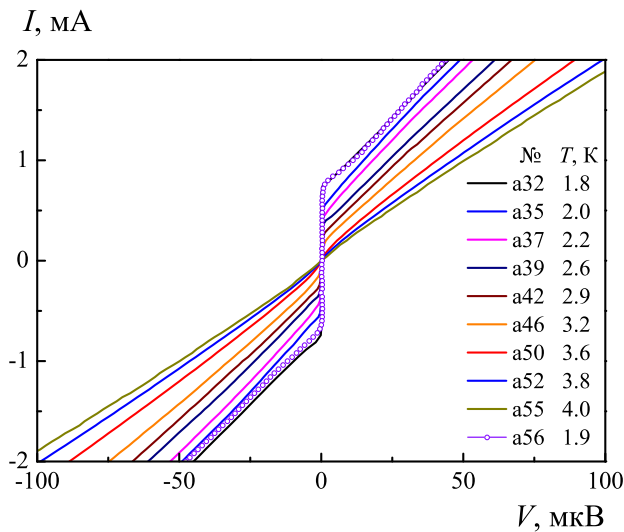


Рис. 3. Вольт-амперные характеристики ВJ-контакта Джозефсона, записанные при разных температурах. Первая а32 и последняя а58 ВАХ серии совпадают, демонстрируя стабильность ТК

положительных (+V) и отрицательных (−V) напряжениях практически симметричны. ВАХ, записанные при нулевой мощности СВЧ-сигнала, имели заметный гистерезис ($+I_C/-I_C \neq 1$), что указывает на конечную емкость ТК. Минимальные различия ВАХ b02 и b44, записанных при $P = 0$ перед началом и после окончания цикла измерений в СВЧ-поле, доказывают стабильность ТК в процессе измерений.

После завершения измерений в СВЧ-поле мы проводили измерения зависимостей критического тока контактов от температуры $I_C(T)$. Несколько ВАХ для одного из ТК, записанных при разных температурах, показаны на рис. 3. Данный ТК был стабилен при повышении температуры от 1.8 до 4.5 K и последующем охлаждении до 1.9 K, что хорошо видно по совпадению ВАХ а32 и а56.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

1. Отметим, что характерные напряжения изученных ТК $V_C \approx 50$ мкВ (рис. 2) отличались от предсказываемых резистивной моделью [4]. Тем не менее, это не является, как уже отмечено во введении, доказательством $s^\pm$ -симметрии ПП в KFe_2As_2 , так как примерно такие же V_C отмечались на контактах из обычных сверхпроводников [25–28] типа SNS, SS^*S , SIS^*IS (S — сверхпроводник, N — нормальный металл, S^* — сверхпроводник с меньшей, чем в S, критической температурой, I — изолятор). Отклонение V_C наших ТК от типичной для

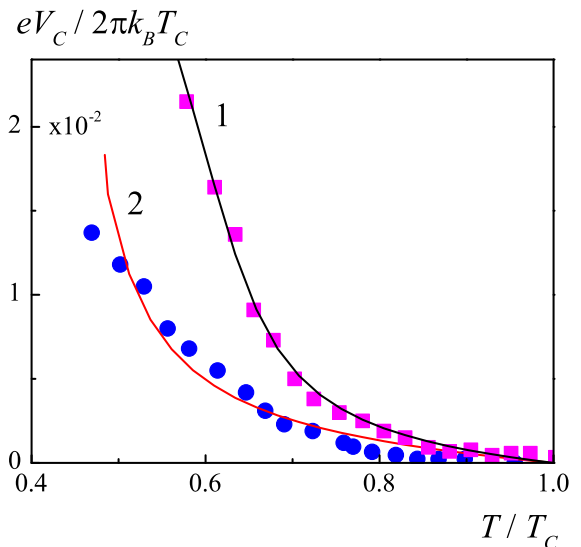


Рис. 4. Символы — зависимости $eV_C(T)/2\pi k_B T_C$ от нормированной температуры T/T_C для контактов NA (1) и BJ (2), измеренные в данной работе. Линии — вычисленные зависимости для SIS^*IS -контактов [26]. Параметры ТК, найденные при аппроксимации: для NA-контактов критическая температура S-электрода $T_C = 4.1$ K, энергетическая щель S-электрода $\Delta_S = 0.62$ мэВ, критическая температура промежуточного слоя S^* $T_C^* = 1.76$ K, параметр подавления $\gamma_{\text{eff}} = 284$, параметр симметрии барьеров $\gamma_- = 1$, сумма квадратов отклонений вычисленной и измеренной зависимостей $m = 1.1 \cdot 10^{-4}$; для ВJ-контактов $T_C = 3.8$ K, $\Delta_S = 1$ мэВ, $T_C^* = 1.8$ K, $\gamma_{\text{eff}} = 1700$, $\gamma_- = 1$, $m = 1.4 \cdot 10^{-5}$

БКШ сверхпроводников величины порядка Δ/e может быть связано также и с рядом сложностей при определении I_C и R_N из начального участка ВАХ [23, 24].

Определим тип слабой связи и симметрии ПП, которые могут описать измеренные зависимости $V_C(T)$ изученных NA- и ВJ-контактов Джозефсона. Для сравнения с теорией измеренные температуры нормировались на T_C , а $eV_C(T)$ на $2\pi k_B T_C$ (k_B — постоянная Больцмана). Полученные величины $eV_C(T/T_C)/2\pi k_B T_C$ показаны символами на рис. 4. Видно, что кривизна зависимостей $V_C(T/T_C)$ положительна вблизи T_C и уменьшается при понижении температуры. Похожие по форме зависимости $V_C(T/T_C)$ наблюдались только на КД из «обычных» сверхпроводников типа SS^*S и SIS^*IS [26–28]. Теоретический анализ таких структур в рамках уравнений Узаделя был дан в статьях [26, 28]. Для аппроксимации измеренных зависимостей мы использовали теорию SIS^*IS -структур [26]. В этой теории рассматривается КД с электродами из одинаковых сверхпроводников S, как в наших

ВJ-контактах. NA-контакты имели более сложную $S^1IS^2IS^2$ -структуру, где S^1 и S^2 — разные сверхпроводники.

Результаты аппроксимации по критерию минимума суммы квадратов отклонений измеренных и вычисленных зависимостей показаны на рис. 4 линиями. В качестве варьируемых параметров использовались критическая температура T_C^* промежуточного S^* -слоя и параметр подавления γ_{eff} . Параметр симметрии барьеров $\gamma_- = 1$. Использование формул теории [26] для NA-контактов Джозефсона не очевидно, тем не менее теория [26] позволяет аппроксимировать зависимости $V_C(T/T_C)$ и для таких контактов.

Параметры SIS*IS-структур, полученные при аппроксимации измеренных зависимостей, приведены в подписи к рис. 4. Аппроксимация измеренных на ВJ- и NA-контактах зависимостей с близкой точностью возможна как при использовании БКШ-зависимостей $\Delta(T)$ и $\Delta(0) = 1.76k_B T_C$, так и с квази-БКШ-зависимостью $\Delta(T)$, при которой $\Delta(T)$ описывается той же формулой, что и в БКШ [57], но $\Delta(0) = 1$ мэВ (энергетическая щель KFe_2As_2 [47]). Такая замена приводила к изменениям только варьируемых параметров. Все измеренные зависимости $V_C(T/T_C)$ можно объяснить SIS*IS-структурой КД с ПП сверхпроводящих электродов s -типа.

Видно, что подавление V_C в ВJ-контактах было больше, чем в NA-контактах. Возможно, это связано с более высокой T_C одного из электродов NA-контакта. Отметим, что в случае применимости SIS*IS-модели в NA- и ВJ-контактах формировалась одинаковая структура, несмотря на разные методы создания. Очевидно, что появление на поверхности кристалла скола, перпендикулярного плоскости ab , слоя S^* с подавленной по сравнению с объемом критической температурой не связано со взаимодействием с водой и кислородом, так как в ВJ-контактах S^* -слой появлялся при разламывании кристалла в жидком гелии. По-видимому, любое скалывание кристаллов KFe_2As_2 в плоскости, перпендикулярной ab , приводит к нарушению кристаллической решетки образца и появлению на поверхности слоя с подавленной T_C .

Мы не смогли аппроксимировать измеренные $V_C(T)$ известными теориями для КД из многозонных сверхпроводников с s - и $s^\pm$ -симметриями ПП [5, 10, 19, 58–61].

2. Чтобы убедиться, что $I_S \sim \sin(\varphi)$, сравним измеренные $i_n^{exp}(k\sqrt{P})$ и вычисленные из RSJ-модели $i_n^{calc}(i_{ac})$ ($i_{ac} = k\sqrt{P}$) зависимости амплитуд ступенек тока на ВАХ. Коэффициент k в i_n^{exp} необхо-

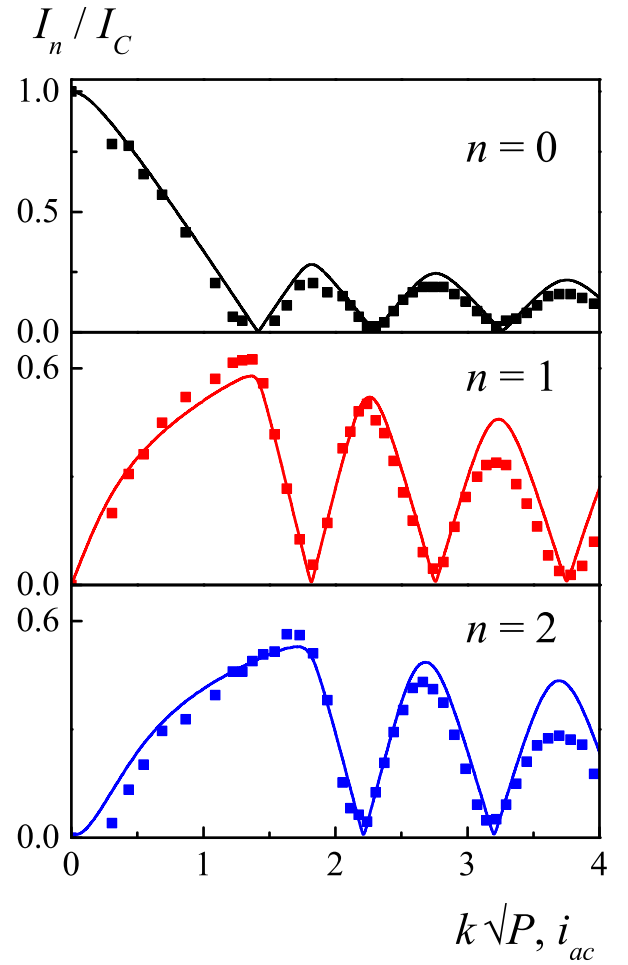


Рис. 5. Символы — измеренные на NA-контактах зависимости нормированного критического тока и амплитуд первых ступенек тока $i_n^{exp}(k\sqrt{P})$ ($n = 0, 1, 2$) от корня из мощности СВЧ-излучения, коэффициент $k = 3.57$. Линии — вычисленные из уравнения RSJ-модели с $\Omega = 0.34$ зависимости амплитуд ступенек тока $i_n^{calc}(i_{ac})$ для $I_S = I_C \sin(\varphi)$

дим для пересчета мощности высокочастотного сигнала в СВЧ-тракте в высокочастотный ток в ТК i_{ac} , нормированный на I_C . Выбор величины k обсудим позже. Зависимости $i_n^{exp}(k\sqrt{P})$ для первых трех ступенек тока одного из ТК показаны символами на рис. 5. Отметим полное подавление ступенек при увеличении мощности СВЧ. Это указывает на отсутствие неджозефсоновских токов и гармоник в сверхпроводящем токе контакта.

Зависимости $i_n^{calc}(i_{ac})$ были вычислены из дифференциального уравнения RSJ-модели идеального контакта Джозефсона с $I_S = I_C \sin(\varphi)$ в поле СВЧ-излучения частотой f , в которое не входят члены, учитывающие емкость и шумы [4, 23, 24]. Для решения этого уравнения необходимо знать нормированную частоту СВЧ $\Omega = 2\pi f / ((2e/\hbar)V_C)$.

Её величина определяется характерным напряжением ТК V_C . Обычно V_C находят из ВАХ-контакта. При этом предполагается, что I_C не размыто шумами, а R_N можно измерить, подавив сверхпроводимость в берегах контакта магнитным полем или по линейному участку ВАХ в области напряжений $V > 2(\Delta_{\text{PbIn}} + \Delta_{\text{KFe}_2\text{As}_2})/e \approx 2$ мВ для нашего ТК (Δ_{PbIn} и $\Delta_{\text{KFe}_2\text{As}_2}$ — энергетические щели электродов контакта), что в нашем случае невозможно. Как правило, вычисленные зависимости $i_n^{\text{calc}}(i_{ac})$ с V_C , найденной из ВАХ, не позволяли аппроксимировать измеренные $i_n^{\text{exp}}(k\sqrt{P})$ [23, 24]. Обычно данная проблема решалась добавлением в уравнение идеального контакта «свободных» (подгоночных) членов, учитывающих емкость и шумы [4, 62–64]. Емкость влияет на период осцилляций, т. е. изменяет величину Ω . Ток шумов i_{noise} уменьшает амплитуду i_n^{calc} , не влияя на период [62–64].

Величину Ω можно найти из периода осцилляций первой ступеньки тока $i_1^{\text{exp}}(\sqrt{P})$. Это позволяет автоматически учесть все характеристики ТК, влияющие на период осцилляций. Такой подход был использован авторами ранее [23, 24]. Для этого из зависимости $i_1^{\text{exp}}(\sqrt{P})$ (рис. 5) мы вычислили нормированный период осцилляций первой ступеньки $\eta_1 = (\eta_1^{(2)} - \eta_1^{(1)})/\eta_1^{(1)} = 0.5$. В этой формуле $i_1^{(1)}$ и $i_1^{(2)}$ — первый и второй минимумы на зависимости первой ступеньки тока от $\sqrt{P}$. Связь нормированного периода осцилляций первой ступеньки тока на ВАХ с Ω , следующая из уравнения RSJ-модели идеального КД с зависимостью $I_S = I_C \sin(\varphi)$, была вычислена в работе [65]. Из приведенных в работах [23, 24, 65] графиков зависимости $\eta_1(\Omega)$ следует, что в нашем случае $\Omega = 0.34$. Далее из RSJ-уравнения были вычислены ВАХ для $i_{ac} = (0-4)$ с этой Ω и построены зависимости $i_n^{\text{calc}}(i_{ac})$ ($n = 0, 1, 2$), которые показаны на рис. 5 линиями. Для зависимостей $i_1^{\text{exp}}(k\sqrt{P})$ (символы) был подобран коэффициент $k = 3.57$, так чтобы первые минимумы вычисленной $i_1^{\text{calc}}(i_{ac})$ и измеренной $i_1^{\text{exp}}(k\sqrt{P})$ ступенек тока совпали. Найденная величина k использовалась как масштабный коэффициент оси абсцисс также и для зависимостей i_0^{exp} и i_2^{exp} . Видно, что периоды осцилляций измеренных $i_n^{\text{exp}}(k\sqrt{P})$ ($n = 0, 1, 2$) и вычисленных $i_n^{\text{calc}}(i_{ac})$ зависимостей, показанные на панелях рис. 5, совпадают для всех трех ступенек тока. Это однозначно доказывает, что осцилляции ступенек тока в СВЧ-поле описываются RSJ-моделью, ток Джозефсона $I_S = I_C \sin(\varphi)$, симметрия ПП в KFe_2As_2 соответствует s -типу. Подобные результаты были получены для всех изученных НА- и ВJ-контактов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены стабильные точечные контакты Джозефсона в стандартной геометрии «игла–наковальня» (NA) между обычным сверхпроводником $\text{Pb}_{0.6}\text{In}_{0.4}$ ($T_C \approx 6.6$ К) и ребром монокристаллической пластинки сверхпроводника на основе железа KFe_2As_2 с $T_C = (3.6-4.6)$ К и контакты на микротрещине (ВJ) в KFe_2As_2 , созданной в жидком гелии. Найдено, что все изученные ТК имели типичную для контактов Джозефсона с FeBS величину характерных напряжений V_C порядка нескольких десятков мкВ. Изучены зависимости V_C от температуры ряда НА- и ВJ-контактов. Показано, что зависимости $V_C(T)$ для всех ТК можно вычислить из известной модели SIS*IS-контакта (S — сверхпроводник, I — изолятор, S* — сверхпроводник с меньшей критической температурой) для сверхпроводников с s -симметрией ПП. Отмечено, что скалывание кристаллов даже в жидком гелии приводит к появлению на поверхности образца слоя с критической температурой меньшей T_C объема кристалла. При температуре $T = 1.8$ К для нескольких ТК измерены ВАХ и зависимости амплитуд первых ступеней тока от мощности СВЧ-излучения с частотой $f = 7.6$ ГГц. Доказано, что сверхпроводящий ток Джозефсона в контактах с KFe_2As_2 пропорционален синусу разности фаз параметров порядка в электродах $I_S = I_C \sin(\varphi)$, что согласуется с обычной s -симметрией энергетической щели в KFe_2As_2 . Таким образом, и температурные зависимости характерного напряжения $V_C(T)$, и период осцилляций ступенек тока КД в СВЧ-поле указывают на s -симметрию ПП в кристаллах KFe_2As_2 .

Финансирование. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума Российской академии наук «Изучение квантовых эффектов в веществе в конденсированном состоянии при сверхнизких температурах».

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano et al., J. Amer. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006).
2. Y. Bang, G. R. Stewart et al., J. Phys.: Condens. Matter **29**, 123003 (2017).
3. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, Rep. Progr. in Physics **74**, 124508 (2011).
4. A. Barone, and G. Paterno. *Physics and Applications of the Josephson Effect*, Wiley, New York (1982).

5. B. Sperstad, J. Linder, and Asle Sudbo, *Phys.Rev.B* **80**, 144507 (2009).
6. Z. Huang and X. Hu, *Appl.Phys.Lett.* **104**, 162602 (2014)
7. S-Z. Lin, *Phys. Rev. B* **86**, 014510 (2012)
8. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, *Phys. Rev. B* **82**, 140509R (2010).
9. Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Matsumoto, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 237003 (2009).
10. Y. Yerin and A. N. Omelyanchouk, *Low Temp. Phys.* **43**, 1013 (2017).
11. X. Zhang, Y. S. Oh, Y. Liu et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 147002 (2009).
12. X. Zhang, S. R. Saha, N. P. Butch et al., *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062510 (2009).
13. S. Schmidt, S. Döring, F. Schmidt et al., *Appl. Phys. Lett.* **97**, 172504, (2010).
14. P. Seidel, *Supercond. Sci. Technol.* **24**, 043001 (2011).
15. S. Döring, S. Schmidt, F. Schmidl, et al., *Supercond. Sci. Technol.* **25**, 084020 (2012).
16. X. Zhang, B. Lee, S. Khim et al., *Phys. Rev. B* **85**, 094521 (2012).
17. S. Döring, M. Monecke, S. Schmidt et al., *J. Appl. Phys.* **115**, 083901 (2014).
18. V. V. Fisun, O. P. Balkashin, O. E. Kvitnitskaya et al., *Fizika Nizkikh Temperatur* **40**, 1175 (2014).
19. A. V. Burmistrova, A. Devyatov, A. A. Golubov et al., *Phys. Rev. B* **91**, 214501 (2015).
20. M. Tortello, V. A. Stepanov, X. Ding et al., *J. Supercond. Novel Magn.*, **28**, 679 (2016).
21. S. Schmidt, S. Döring, N. Hasan et al., *Phys. Status Solidi B*, **254**, 1600165 (2017).
22. W. Tian, Y. Lv, Z. Xu et al., *Supercond. Sci. Technol.* **33**, 025014 (2020).
23. B. A. Степанов, М. В. Голубков, *ЖЭТФ* **157**, 245 (2020).
24. V. A. Stepanov, C. Lin, R. S. Gonnelli et al., *Scientific Reports* **11**, 23986 (2021).
25. T. Scheller, F. Mueller, R. Wendisch et al., *Phys. Proc.* **36**, 48 (2012).
26. M. Yu. Kupriyanov, A. Brinkman, A. A. Golubov et al., *Physica C* **326-327**, 16 (1999).
27. D. Cassel, G. Pickartz, M. Siegel et al., *Physica C* **350**, 276 (2001).
28. A. A. Golubov, M. Yu. Kupriyanov, and E. Il'ichev, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 411 (2004).
29. V. Stanev, *Supercond. Sci. Technol.* **28**, 014006 (2015).
30. Yong Liu, M. A. Tanatar, V. G. Kogan et al., *Phys. Rev. B* **87**, 134513 (2013).
31. M. Rotter, M. Pangerl, M. Tegel et al., arXiv:0807.4096v2.
32. H. Luo, Z. Wang, H. Yang, P. Cheng et al., *Supercond. Sci. Technol.*, **21**, 125014 (2008).
33. F. F. Tafti, A. Juneau-Fecteau, M-E. Delage et al., *Nature Phys.* **9**, 349 (2013).
34. B. Wang, K. Matsubayashi, J. Cheng et al., *Phys. Rev. B* **94**, 020502(R) (2016).
35. T. Terashima, M. Kimata, H. Satsukawa et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063702 (2009).
36. K. Kihou, T. Saito, S. Ishida et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 124713 (2010).
37. T. Terashima, M. Kimata, N. Kurita et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 053702 (2010).
38. T. Terashima, N. Kurita, M. Kimata et al., *Phys. Rev. B* **87**, 224512 (2013).
39. S. Backes, D. Guterding, H. O. Jeschke et al., *New J. Phys.* **16**, 083025 (2014).
40. S. Maiti, M. M. Korshunov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **85**, 014511 (2012).
41. H. Fukazawa, T. Saito, Y. Yamada et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, sa118 (2011).
42. J.-Ph. Reid, M. A. Tanatar, A. Juneau-Fecteau et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 087001 (2012).
43. M. Abdel-Hafiez, S. Aswartham, S. Wurmehl et al., *Phys. Rev. B* **85**, 134533 (2012).
44. F. Hardy, A. E. Bohmer, D. Aoki et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 027002 (2013).
45. K. Hashimoto, A. Serafin, S. Tonegawa et al., *Phys. Rev. B* **82**, 014526 (2010).
46. D. Fang, X. Shi, Z. Du et al., *Phys. Rev. B* **92**, 144513 (2015).
47. K. Okazaki, Y. Ota, Y. Kotani et al., *Science* **337**, 1314 (2012).
48. Yu. G. Naidyuk, O. E. Kvitnitskaya, N. V. Gamayunova et al., *Phys. Rev. B* **90**, 094505 (2014).

49. М.В. Рослова, Дисс. канд. хим. наук, МГУ, Москва (2014).
50. Y. Ota, K. Okazaki, Y. Kotani et al., Phys. Rev. B **89**, 0811103 (2014).
51. N. Xu, P. Richard, X. Shi et al., Phys. Rev. B **88**, 220508(R) (2013).
52. С. И. Веденеев, М. В. Голубков, Ю. И. Горина и др., ЖЭТФ **154**, 844 (2018).
53. C. T. Rao, W. Dubeck, F. Rothwarf. Phys. Rev. B **7**, 1866 (1973).
54. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jansen, P. Samuelli et al., Phys. Rev. B **49**, 9823 (1994).
55. К. К. Лихарев. УФН **127**, 185 (1979).
56. К. К. Likharev. Rev. Mod. Phys. **51**, 101, (1979).
57. R. Prozorov and R. W. Giannetta, Supercond. Sci. Technol. **19**, R41 (2006).
58. A. Brinkman, A. A. Golubov, and H. Rogalla et al., Phys. Rev. B **65**, 180517(R) (2002).
59. C. Nappi, F. Romeo, E. Sarnelli et al., Phys. Rev. B **92**, 224503 (2015).
60. A. Sasaki, S. Ikegaya, T. Habe et al., Phys. Rev. B **101**, 185501 (2020).
61. A. A. Kalenyuk, E. A. Borodianskyi, A. A. Kordyuk et al., Phys. Rev. B **103**, 214507 (2021).
62. P. Seidel, M. Siegel, E. Heinz, Physica C **180**, 284 (1991).
63. F. Busse, R. Nebel, P. Herzog et al., Appl. Phys. Lett., **63**, 1687 (1993).
64. R. L. Kautz, R. H. Ono, and C. D. Reintsema, Appl. Phys. Lett. **61**, 342 (1992).
65. К. К. Лихарев, В. К. Семенов, Радиотехника и электроника **16**, 2367 (1971).

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ТЕОРИИ ГИНЗБУРГА–ЛАНДАУ

*Е. Р. Подоляк**

*Институт физических проблем им. П.Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2022 г.,
после переработки 2 декабря 2022 г.
Принята к публикации 8 декабря 2022 г.

Изучается вопрос об устойчивости сверхпроводящих состояний с захваченным магнитным потоком в сферическом образце. Рассматриваются сверхпроводники с конечным значением параметра Гинзбурга–Ландау, в частности, сверхпроводники I рода, для которых важную роль играет искажение магнитного поля вблизи образца. Предполагается, что размер образца не слишком велик по сравнению с корреляционной длиной $\xi(T)$, а сверхпроводящее состояние имеет аксиальную симметрию. Обсуждается возможность существования состояний с захваченным потоком в нулевом внешнем поле. Проводится сравнение с результатами для образца цилиндрической формы.

DOI: 10.31857/S0044451023020062
EDN: OQICSG

1. ВВЕДЕНИЕ

Решение уравнений Гинзбурга–Ландау позволяет найти экстремум свободной энергии, но не позволяет указать тип этого экстремума: минимум, седловая точка или максимум. Поскольку существовать могут только состояния, соответствующие минимуму свободной энергии, то определение типа экстремума является важным аспектом теории Гинзбурга–Ландау. Тип экстремума можно выяснить с помощью изучения устойчивости решений Гинзбурга–Ландау.

Традиционный подход к этому вопросу основан на том, что энергия Гинзбурга–Ландау является эрмитовым функционалом параметра порядка, и, следовательно, состояние с наименьшей энергией является равновесным и заведомо устойчиво. Поэтому, если из возможных решений выбирать состояние с наименьшей энергией, то вопрос о его устойчивости решается автоматически.

Однако, такой подход не позволяет изучать метастабильные состояния, которые имеют большую энергию, чем равновесные, но тем не менее, являются устойчивыми по отношению к малым возмуще-

ниям. Определение области существования метастабильных состояний особенно важно для сверхпроводников I рода, поскольку именно метастабильные состояния отвечают за гистерезисные явления, наблюдаемые в магнитном поле.

С вычислительной точки зрения определение устойчивости решения является трудоемкой задачей. Поэтому, для ее решения приходится использовать какие-либо упрощающие предположения. Одним из таких упрощений, которое тем не менее представляет практический интерес, является изучение мезоскопических образцов, у которых симметрия решения навязывается симметрией самого образца. В случае сферических образцов за счет этого можно свести трехмерную задачу к аксиально-симметричной двумерной.

Вопрос об устойчивости решений Гинзбурга–Ландау, по-видимому, был впервые рассмотрен в [1]. В этой работе изучаются сверхпроводники II рода, у которых параметр Гинзбурга–Ландау очень велик: $\kappa \rightarrow \infty$. В этом случае уравнения Гинзбурга–Ландау можно решать в линейном приближении, поскольку почти во всем диапазоне полей параметр порядка мал по сравнению с равновесным. Кроме того, в этом случае пренебрежимо малы и сверхпроводящие токи, а магнитное поле можно считать неискаженным. Эти соображения значительно упрощают исследование устойчивости решений в случае сверхпроводников II рода с большим значением κ .

* E-mail: eee@kapitza.ras.ru

В настоящей работе мы сформулируем задачу устойчивости для произвольного значения параметра Гинзбурга–Ландау и будем учитывать как нелинейный вклад от параметра порядка, так и искажение магнитного поля, вызванное сверхпроводящими токами. Эти требования являются необходимыми для сверхпроводников с конечным значением κ и, в частности, для сверхпроводников I рода.

Настоящая работа направлена на изучение возможностей теории Гинзбурга–Ландау для объяснения наблюдаемых особенностей кривой намагничивания монокристаллов свинца [2]. Специальное внимание в работе уделяется адаптации получаемых соотношений для численного счета.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Существенной особенностью сверхпроводящих образцов сферической формы является искажение магнитного поля в окружающем пространстве. Поэтому для сверхпроводника, находящегося во внешнем поле H_0 , кроме энергии Гинзбурга–Ландау необходимо также учитывать диамагнитную энергию образца и энергию искаженного магнитного поля.

Рассмотрим выражение для плотности свободной энергии сверхпроводника [3] при постоянном внешнем поле

$$F = g \left| \nabla \Psi - i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \Psi \right|^2 + \alpha(T - T_c) |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{|\mathbf{B}|^2}{8\pi} - \frac{(\mathbf{B}, \mathbf{H}_0)}{4\pi}, \quad (1)$$

где

$$g = \frac{\hbar^2}{4m}, \quad \Phi_0 = \frac{hc}{2|e|}.$$

В данной работе мы не будем рассматривать какую-либо дополнительную свободную энергию, связанную с поверхностью образца, и поэтому будем использовать естественные граничные условия теории Гинзбурга–Ландау, которые следуют из (1). Соотношения, приводимые ниже, также соответствуют теории Гинзбурга–Ландау и служат лишь для определения используемых в работе обозначений.

Из (1) можно получить равновесное значение параметра порядка Ψ в нулевом поле

$$|\Psi_0(T)|^2 = \frac{\alpha}{\beta} (T_c - T) \quad (2)$$

и термодинамическое критическое поле

$$H_c(T) = \alpha(T_c - T) \sqrt{\frac{4\pi}{\beta}}. \quad (3)$$

В рассматриваемой задаче в части образца, содержащей захваченный поток, параметр порядка пренебрежимо мал, а магнитное поле практически однородно. Поэтому в качестве единицы длины мы выбираем корреляционную длину

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{g}{\alpha(T_c - T)}}, \quad (4)$$

а естественной единицей магнитного поля будет поле абсолютной неустойчивости нормальной фазы

$$H_{c2}(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2(T)}. \quad (5)$$

Эти единицы не зависят от коэффициента β и хорошо подходят для случая $|\Psi| \ll |\Psi_0|$. В дальнейшем мы используем безразмерные величины, которые обозначаем соответствующими маленькими буквами:

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{R}}{\xi}, \quad \mathbf{b} = \frac{\mathbf{B}}{H_{c2}}, \quad \mathbf{a} = \frac{\mathbf{A}}{\xi H_{c2}} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \xi \mathbf{A}. \quad (6)$$

Сделав переход к безразмерному параметру порядка

$$\psi = \frac{\Psi}{|\Psi_0|}, \quad (7)$$

и используя определение параметра Гинзбурга–Ландау

$$\kappa = \frac{\Phi_0}{2\pi} \sqrt{\frac{\beta}{8\pi g^2}}, \quad (8)$$

можно переписать плотность свободной энергии (1) в виде

$$F = \frac{H_c^2 \xi^3}{4\pi} \times \left\{ |\nabla \psi - i \mathbf{a} \psi|^2 - |\psi|^2 + \frac{1}{2} |\psi|^4 + \kappa^2 |\mathbf{b}|^2 - 2\kappa^2 (\mathbf{b}, \mathbf{h}_0) \right\}, \quad (9)$$

где

$$\mathbf{h}_0 = \frac{\mathbf{H}_0}{H_{c2}}$$

обозначает приложенное магнитное поле.

Плотность свободной энергии (9) удобно отсчитывать от энергии нормальной фазы ($\psi = 0$, $\mathbf{b} = \mathbf{h}_0$)

$$\tilde{F} = \frac{H_c^2 \xi^3}{4\pi} \times \left\{ |\nabla \psi - i \mathbf{a} \psi|^2 - |\psi|^2 + \frac{1}{2} |\psi|^4 + \kappa^2 |\mathbf{b} - \mathbf{h}_0|^2 \right\}. \quad (10)$$

Подчеркнем еще раз, что поскольку магнитное поле вне образца отличается от приложенного поля, то минимизацию свободной энергии нужно выполнять во всем пространстве, а не только внутри образца.

3. АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ СОСТОЯНИЕ

Рассмотрим сферический образец (радиуса r_s), находящийся во внешнем магнитном поле (h_0), направленном вдоль оси z . В этом случае удобно пользоваться цилиндрической системой координат (ρ, φ, z) . Будем считать, что сверхпроводящее состояние имеет аксиальную симметрию, и фаза параметра порядка $\phi = n\varphi$ пропорциональна азимутальному углу. Аксиальной симметрии параметра порядка

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\rho, z)| e^{in\varphi} \quad (11)$$

соответствует симметрия векторного потенциала

$$\mathbf{a}(\mathbf{r}) = a(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi. \quad (12)$$

Поэтому удобно воспользоваться лондоновской калибровкой векторного потенциала $\mathbf{q}(\mathbf{r}) = \mathbf{a} - \nabla\phi = q(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi$, в которой параметр порядка $\psi = \psi^* = f(\rho, z)$ является вещественной функцией координат.

Свободную энергию в лондоновской калибровке можно представить в виде интеграла

$$E = \frac{H_c^2 \xi^3}{2} \int \rho d\rho \int dz \times \\ \times \left\{ |\nabla f|^2 + q^2 f^2 - f^2 + \frac{1}{2} f^4 + \kappa^2 |\mathbf{b} - \mathbf{h}_0|^2 \right\}, \quad (13)$$

где

$$q = a - n/\rho, \quad (14)$$

$$\mathbf{b} = \text{rot } \mathbf{a} = \text{rot } \mathbf{q} = \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho q) \mathbf{e}_z - \partial_z q \mathbf{e}_\rho. \quad (15)$$

Приравнивая нулю вариацию энергии (13), получим уравнение Гинзбурга–Ландау

$$\Delta f = f (q^2 - 1 + f^2), \quad (16)$$

где Δ обозначает двумерный оператор Лапласа

$$\Delta = \partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho + \partial_z^2$$

в цилиндрической системе координат, и уравнение Максвелла

$$-\text{rot } \mathbf{b} = \frac{f^2}{\kappa^2} \mathbf{q}. \quad (17)$$

Векторный потенциал и сверхпроводящий ток в рассматриваемой задаче имеют только $\mathbf{e}_\varphi$ компоненту, поэтому уравнение (17) можно переписать в скалярном виде

$$\partial_\rho \left(\frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho q) \right) + \partial_z^2 q = \frac{f^2}{\kappa^2} q. \quad (18)$$

Приравнивая нулю вариацию энергии (13) на поверхности шара ($r = r_s$) получаем граничное условие Гинзбурга–Ландау

$$\partial_n f(r_s) = 0, \quad (19)$$

где

$$\mathbf{n} = \frac{\rho}{r} \mathbf{e}_\rho + \frac{z}{r} \mathbf{e}_z$$

— нормаль к поверхности образца, и условие непрерывности магнитного поля на границе образца.

Вне образца (18) сводится к уравнению Лапласа

$$\Delta q = \frac{1}{\rho^2} q, \quad (20)$$

для которого существует точное решение в виде разложения по мультиполям

$$q(\rho, z) = \frac{1}{2} h_0 \rho - \frac{n}{\rho} + \sum_{j=1}^{\infty} C_j \frac{P_j^1(\rho, z)}{r^{j+1}}, \quad (21)$$

где коэффициенты C_j обозначают мультипольные моменты, а $P_j^1(\rho, z)$ — присоединенные функции Лежандра. Решение задачи симметрично относительно экваториальной плоскости, и для векторного потенциала справедливо $q(\rho, -z) = q(\rho, z)$, поэтому в разложении (21) отличны от нуля только мультипольные моменты с нечетными индексами.

Магнитное поле вне образца, как правило, содержит большое число мультиполей, поэтому выгодно решать (20) численно, а выражение (21) использовать только для задания граничного условия. При $r \rightarrow \infty$ это приводит к естественному условию — магнитное поле равно приложенному. На конечном радиусе $r = r_{out}$, которым ограничена область численного счета, граничное условие должно учитывать остаточный вклад от мультиполей.

В случае уравнения Лапласа (20) граничное условие на конечном радиусе выражает нормальную производную векторного потенциала в каждой точке границы

$$\partial_r q = \frac{1}{r} \left[\frac{1}{2} h_0 \rho + \frac{n}{\rho} - \sum_{j=1}^{\infty} (j+1) C_j \frac{P_j^1(\rho, z)}{r^{j+1}} \right] \quad (22)$$

через значение самого векторного потенциала. Поскольку и векторный потенциал (21), и его нормальная производная (22) являются функциями мультипольных моментов, то граничное условие представляет собой неявный способ определения мульт-

типольных моментов. Пользуясь ортогональностью функций Лежандра можно вычислить

$$C_j = \frac{2j+1}{2j(j+1)} r_{out}^{j-1} \times \int_{r=r_{out}} \rho dl \left[q(\rho, z) - \frac{1}{2} h_0 \rho + \frac{n}{\rho} \right] P_j^1(\rho, z), \quad (23)$$

где

$$\mathbf{l} = -\frac{z}{r} \mathbf{e}_\rho + \frac{\rho}{r} \mathbf{e}_z$$

обозначает касательную к границе рабочей области.

При такой формулировке граничного условия, численное решение (20) не зависит (с вычислительной точностью) от величины r_{out} . Значение r_{out} влияет только на точность вычисления мультипольных моментов и на общий объем вычислений.

По мере увеличения r_{out} уменьшается влияние высших мультиполей, но при этом ухудшается точность вычисления мультипольных моментов, поскольку выражение в квадратных скобках в (23) стремится к нулю. В дальнейшем нам потребуется значение дипольного момента (C_1), поэтому мы выбираем r_{out} так, чтобы дипольное слагаемое ($j = 1$) было не слишком мало как по отношению к потенциалу неискаженного поля, так и по отношению к сумме остальных мультиполей. В работе мы используем $r_{out} = 10 r_s$, при котором относительная погрешность вычисления дипольного момента не превышает 10^{-3} .

Оставшиеся граничные условия сводятся к требованию непрерывности функций ψ , $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ на оси образца. Отметим, что вариационные граничные условия при $\rho = 0$

$$\rho \partial_\rho f = 0, \quad \rho \partial_z q = 0 \quad (24)$$

допускают особенности в функциях $\partial_\rho f$ и q .

Численное интегрирование системы уравнений (16), (17) вблизи оси образца представляет некоторую трудность. Дело в том, что при $\rho \rightarrow 0$ модуль параметра порядка изменяется как $f(\rho, z) \propto \rho^n$, и при больших значениях n — это практически ступенчатая функция, которая вблизи оси становится исчезающе малой.

Проблему с быстрым изменением функции f вблизи оси можно устранить с помощью замены переменных

$$g = \ln f, \quad (25)$$

но функция g приобретает при $\rho \rightarrow 0$ логарифмическую расходимость. Для численного счета расходимости в функциях g и q необходимо выделить

$$\tilde{g} = g - n \ln \rho, \quad \tilde{q} = q + \frac{n}{\rho}. \quad (26)$$

Таким образом, система уравнений Гинзбурга–Ландау приобретает вид

$$\Delta \tilde{g} = \tilde{q}^2 - |\nabla \tilde{g}|^2 - \frac{2n}{\rho} (\tilde{q} + \partial_\rho \tilde{g}) - 1 + f^2, \quad (27)$$

$$\Delta \tilde{q} = \frac{1}{\rho^2} \tilde{q} + \frac{f^2}{\rho^2} q. \quad (28)$$

Кроме конечности функций $\tilde{g}$ и $\tilde{q}$, входящих в эти уравнения, при $\rho \rightarrow 0$ справедливо также $\tilde{q} \propto \rho^1 \rightarrow 0$ и $\partial_\rho \tilde{g} \propto \rho^1 \rightarrow 0$.

Можно видеть, что в правой части уравнения (27) присутствуют неопределенности вида $0/0$, а в (28) первое слагаемое расходится как ρ^{-1} . Способ обработки этих особенностей определяется конкретной программой численного счета. Мы используем программу FlexPDE [5], в которой эта проблема не существенна благодаря интерполяции функций внутри элементов пространственной сетки, примыкающих к оси образца. Этого оказывается достаточно для решения системы (27), (28) с точностью лучше, чем 10^{-5} .

Точность вычислений вблизи оси образца можно улучшить, если дополнительно ввести вспомогательные функции

$$\tilde{t} = \frac{1}{\rho} \partial_\rho \tilde{g}, \quad \tilde{s} = \frac{2}{\rho} \tilde{q}, \quad (29)$$

уравнения для которых можно получить простой подстановкой (29) в (27), (28). Использование функций $\tilde{t}$ и $\tilde{s}$ позволяет вычислять решение системы уравнений Гинзбурга–Ландау (f, q) с точностью ($\approx 10^{-7}$) достаточной для последующего анализа его устойчивости.

Приведем некоторые общие свойства решений системы уравнений Гинзбурга–Ландау. Для вычисления энергии полученного сверхпроводящего состояния можно проинтегрировать первое слагаемое в (13) по частям и подставить соотношение (16)

$$E = \frac{H_c^2 \xi^3}{4} \int \rho d\rho \int dz \{ -f^4 + 2\kappa^2 |\mathbf{b} - \mathbf{h}_0|^2 \}. \quad (30)$$

Это выражение не содержит векторного потенциала и производных параметра порядка и оказывается более удобным для численного счета, чем (13).

Отметим, что конечная магнитная энергия вне образца приводит к изменению величины критического поля H_c от его значения (3) для бесконечного сверхпроводника. Пренебрегая глубиной проникновения поля в образец, можно показать [3], что для майснеровского состояния ($n = 0$) вне образца отличен от нуля только дипольный момент

$$C_1 = -h_0 \frac{r_s^3}{2}. \quad (31)$$

В этом приближении энергию майснеровского состояния можно вычислить аналитически

$$E = \frac{H_c^2 (\xi r_s)^3}{6} \left(\frac{3}{2} \kappa^2 h_0^2 - \frac{1}{2} \right). \quad (32)$$

Из (32) следует, что энергия сверхпроводящего шара во внешнем поле сравнивается с энергией шара в нормальном состоянии при приложении поля

$$h_0 = h_{cM} = \frac{1}{\kappa\sqrt{3}}, \quad (33)$$

в то время как термодинамическое критическое поле в принятых обозначениях

$$h_c = \frac{1}{\kappa\sqrt{2}}. \quad (34)$$

Уменьшение критического поля в случае сферического образца соответствует тому, что при приложении внешнего поля $h_0 = h_{cM}$ поле на экваторе образца ($\rho = r_s, z = 0$) с учетом размагничивающего фактора составит

$$b_e = \frac{3}{2} h_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} h_c.$$

В используемых здесь единицах безразмерный квант магнитного потока равен 2π , поэтому можно сформулировать условие квантования захваченного в образце магнитного потока

$$\int_0^{\rho^*} \rho d\rho b_z(\rho, 0) = n. \quad (35)$$

Здесь ρ^* обозначает радиус в экваториальном сечении образца, на котором сверхпроводящий ток обращается в 0, т.е. меняет свое направление. Поэтому можно считать, что число n описывает не только набег фазы параметра порядка при обходе образца, но и количество квантов захваченного образцом магнитного потока.

В данной работе мы не приводим вычисленные функции $f(\rho, z)$ и $q(\rho, z)$ двух координат, а представляем результаты вычислений в виде кривой намагничивания, т.е. в виде зависимости дипольного момента $M(h_0) = C_1$ от приложенного поля. Такое представление удобно тем, что оно соответствует зависимостям, измеряемым в эксперименте. Зависимость $M(h_0)$ — многозначная, т.к. каждому значению параметра n на ней соответствует отдельная ветвь. Различия между ветвями носят количественный характер, поэтому в дальнейшем мы используем для иллюстраций только одну ветвь: $n = 10$, которая показана на рис.1.

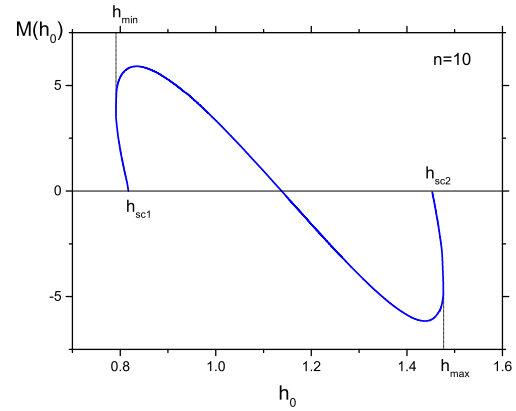


Рис. 1. Кривая намагничивания для образца $r_s = 5$, $\kappa = 0.6$ при $n = 10$

Кривая намагничивания, показанная на этом рисунке, демонстрирует поведение, характерное для сверхпроводников I рода, а именно, существование двух решений при некоторых значениях поля.

Сначала рассмотрим точки окончания кривой ($h_0 = h_{sc1}, h_{sc2}$). В этих точках параметр порядка обращается в нуль. И, следовательно, в окрестности этих точек уравнение Гинзбурга–Ландау можно линеаризовать. Решения линейной задачи для образцов как сферической, так и для цилиндрической формы получены в [4]. Кроме величин критических полей $h_{sc}(r_s, n)$ в [4] вычислено максимальное значение $n = n_{max}(r_s)$, а также критическое значение $\kappa_{crit}(r_s)$ параметра Гинзбурга–Ландау, которое определяет знак производной кривой намагничивания при подходе к h_{sc} .

Результирующую кривую намагничивания образца мы получаем, повторяя вычисления магнитного момента для всех значений $0 \leq n \leq n_{max}$.

В общей постановке задачи о свойствах сферического образца в магнитном поле остаются еще два параметра: радиус образца и параметр Гинзбурга–Ландау κ . Следует напомнить, что уравнения Гинзбурга–Ландау (16), (17) не содержат температурных зависимостей. От температуры зависят лишь размерные единицы (4) и (5). Для сферических образцов конечных размеров, рассматриваемых здесь, ситуация качественно меняется. Физическому размеру образца R_s соответствует безразмерный радиус

$$r_s = \frac{R_s}{\xi(T)} \propto \sqrt{T_c - T}, \quad (36)$$

который меняется с температурой и стремится к нулю при температуре сверхпроводящего перехода. Поэтому, в эксперименте можно управлять величи-

ной r_s с помощью изменения температуры. Хорошо известно [6], что маленький образец (при $r_s < 1.33$) не может иметь состояний с захваченным потоком. И, наоборот, при $r_s \gg 1$ наблюдаемое промежуточное состояние имеет сложную структуру без аксиальной симметрии. Тем не менее, подчеркнем, что при приближении к сверхпроводящему переходу всегда существует область температур, в которой r_s не слишком велик, и для которой применимы результаты настоящей работы.

В данной работе мы не проводим исследование влияния параметров r_s и κ , а ограничиваемся значениями радиуса $r_s = 5$ и параметра Гинзбурга–Ландау $\kappa = 0.6$. Такие значения выбраны для удобства сравнения с результатами [4], полученными для образца цилиндрической формы, который имеет такие же радиус и κ .

Уже из рис.1 видно, что при заданном внешнем поле задача может иметь одно, два или ни одного (нетривиального) решения. Поэтому возникает вопрос: какое из возможных решений реализуется, и как изменяется число n сверхпроводящего состояния при изменении внешнего поля. На этот вопрос отвечает исследование устойчивости полученных решений.

4. УСТОЙЧИВОСТЬ

В предыдущем параграфе описана процедура вычисления сверхпроводящего состояния, которое имеет аксиальную симметрию. Возмущения, которые приводят к его разрушению, не обязательно имеют такую же симметрию. Ниже мы исследуем устойчивость решения по отношению к возмущениям произвольного вида.

В рассматриваемой задаче произвольные возмущения описываются четырьмя вещественными функциями: одна функция — $p(\rho, \varphi, z)$ описывает возмущение модуля параметра порядка $f(\rho, \varphi, z) = f_0(\rho, z) + p(\rho, \varphi, z)$, и еще три функции описывают возмущение компонент векторного потенциала:

$$\mathbf{q}(\rho, \varphi, z) = \mathbf{q}_0(\rho, z) + \delta \mathbf{q}(\rho, \varphi, z),$$

$$\delta \mathbf{q} = q_\rho(\rho, \varphi, z) \mathbf{e}_\rho + q_z(\rho, \varphi, z) \mathbf{e}_z + q_\varphi(\rho, \varphi, z) \mathbf{e}_\varphi.$$

Здесь и далее индекс '0' обозначает то решение уравнений Гинзбурга–Ландау — $f_0, \mathbf{q}_0$, устойчивость которого мы изучаем. Отметим, что использование лондоновской калибровки значительно упрощает постановку задачи об устойчивости, поскольку исключает возмущения фазы параметра порядка,

которые с учетом изменения калибровки, не меняют состояние сверхпроводника.

Устойчивость сверхпроводящего состояния по отношению к малым возмущениям определяется знаком второй вариации энергии

$$\begin{aligned} \delta^2 E = \int \rho d\rho \int d\varphi \int dz \times \\ \times \left\{ |\nabla p|^2 + p^2 (\mathbf{q}_0^2 - 1 + 3f_0^2) + \right. \\ \left. + 4f_0 p(\mathbf{q}_0, \delta \mathbf{q}) + f_0^2 |\delta \mathbf{q}|^2 + \kappa^2 |\delta \mathbf{b}|^2 \right\}, \end{aligned} \quad (37)$$

где

$$\delta \mathbf{b} = \text{rot}(\delta \mathbf{q}).$$

Устойчивыми (в малом) являются состояния, для которых любое возмущение приводит к положительной $\delta^2 E$. И, наоборот, если найдется какое-либо возмущение, для которого $\delta^2 E < 0$, то сверхпроводящее состояние является неустойчивым.

Следуя общепринятой процедуре, разложим возмущение в ряд Фурье по азимутальному углу φ :

$$\begin{aligned} p(\rho, \varphi, z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\varphi} p_k(\rho, z), \quad q_\varphi(\rho, \varphi, z) = \\ = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\varphi} q_{k\varphi}(\rho, z), \end{aligned} \quad (38)$$

$$q_\rho(\rho, \varphi, z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\varphi} q_{k\rho}(\rho, z), \quad (39)$$

$$q_z(\rho, \varphi, z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\varphi} q_{kz}(\rho, z). \quad (40)$$

Теперь, подставим (39) – (41) в (37) и проинтегрируем по φ . С учетом ортогональности фурье-гармоник получим

$$\begin{aligned} \delta^2 E = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \rho d\rho \int dz \times \\ \times \left\{ |\nabla p_k|^2 + \frac{k^2}{\rho^2} |p_k|^2 + |p_k|^2 (\mathbf{q}_0^2 - 1 + 3f_0^2) + \right. \\ \left. + 4f_0 p_k q_{0k} + f_0^2 |\delta \mathbf{q}_k|^2 + \kappa^2 |\delta \mathbf{b}_k|^2 \right\}, \end{aligned} \quad (41)$$

где

$$\delta \mathbf{q}_k = q_{k\rho}(\rho, z) \mathbf{e}_\rho + q_{kz}(\rho, z) \mathbf{e}_z + q_{k\varphi}(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi,$$

$$\delta \mathbf{b}_k = b_{k\rho}(\rho, z) \mathbf{e}_\rho + b_{kz}(\rho, z) \mathbf{e}_z + b_{k\varphi}(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi$$

и

$$b_{k\rho} = -\partial_z q_{k\varphi} + i \frac{k}{\rho} q_{kz}, \quad (42)$$

$$b_{kz} = \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho q_{k\varphi}) - i \frac{k}{\rho} q_{k\rho}, \quad (43)$$

$$b_{k\varphi} = -\partial_\rho q_{kz} + \partial_z q_{k\rho}. \quad (44)$$

Поскольку все функции (38)–(40) вещественные, то для амплитуд гармоник выполняются соотношения $p_{-k} = p_{+k}^*$ и т. д. Попарно суммируя в (41) слагаемые с $+k$ и $-k$ получим

$$\delta^2 E = \delta^2 E_0(p_0, q_0r, q_0\varphi, q_0z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \delta^2 E_k(p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}), \quad (45)$$

где

$$\begin{aligned} \delta^2 E_k(p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}) = & \int \rho d\rho \int dz \times \\ & \times \left\{ |\nabla p_k|^2 + |p_k|^2 \left(q_0^2 + \frac{k^2}{\rho^2} - 1 + 3f_0^2 \right) + \right. \\ & + 2f_0 q_0 \left(p_k^* q_{k\varphi} + p_k q_{k\varphi}^* \right) + f_0^2 |q_{k\varphi}|^2 + \\ & + \kappa^2 |\text{rot}(q_{k\varphi} \mathbf{e}_\varphi)|^2 + \\ & + \frac{k^2 \kappa^2 + \rho^2 f_0^2}{\rho^2} (|q_{k\rho}|^2 + |q_{kz}|^2) + \kappa^2 |\partial_z q_{k\rho}|^2 - \\ & - \kappa^2 (\partial_\rho q_{kz}^* \partial_z q_{k\rho} + \partial_\rho q_{kz} \partial_z q_{k\rho}^*) + \kappa^2 |\partial_\rho q_{kz}|^2 - \\ & - \kappa^2 \frac{ik}{\rho^2} (\partial_\rho (\rho q_{k\varphi}^*) q_{k\rho} - \partial_\rho (\rho q_{k\varphi}) q_{k\rho}^*) - \\ & \left. - \kappa^2 \frac{ik}{\rho} (\partial_z q_{k\varphi}^* q_{kz} - \partial_z q_{k\varphi} q_{kz}^*) \right\}. \quad (46) \end{aligned}$$

Теперь устойчивость k -й азимутальной гармоники возмущения можно исследовать независимо от остальных. Гармоники $k = 0$ и $k = n$ являются выделенными, что типично для сферической геометрии. Мы рассмотрим эти гармоники отдельно в конце параграфа. Сейчас остановимся на случае $0 < k < n$.

Определим норму собственной функции с помощью интеграла

$$\begin{aligned} \|p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}\| = & \int \rho d\rho \int dz \times \\ & \times \left\{ |p_k|^2 + w_{k\rho} |q_{k\rho}|^2 + w_{k\varphi} |q_{k\varphi}|^2 + w_{kz} |q_{kz}|^2 \right\}, \quad (47) \end{aligned}$$

где неотрицательные весовые функции $\{w_{k\alpha}(\rho, z)\}$ определяют условия ортонормированности компонент $\{p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}\}$ собственных функций.

Задача об устойчивости решения по отношению к k -й гармонике произвольного возмущения заключается в определении знака наименьшего значения (46) при фиксированной норме (47). Используя, например, метод множителей Лагранжа эта задача сводится к вычислению знака наименьшего собственного значения E_k в задаче

$$\delta^2 E_k(p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}) = E_k \|p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}\|. \quad (48)$$

Следует подчеркнуть, что выбор весовых функций $\{w_{k\alpha}\}$ влияет как на форму самих собственных функций, так и на спектр собственных значений. Здесь ключевым моментом является то, что знак наименьшего собственного значения и, следовательно, устойчивость k -й гармоники не зависит от выбора $\{w_{k\alpha}\}$. В терминах линейной алгебры это утверждение означает, что положительная обусловленность квадратичной формы не зависит от выбора базисных векторов.

На практике мы выбираем весовые функции так, чтобы минимизировать время вычислений, а собственная функция была максимально гладкой. Поскольку выбор $\{w_{k\alpha}\}$ не имеет принципиального значения при анализе устойчивости, то далее для простоты изложения положим все $w_{k\alpha} = 0$.

Выражение (46) можно минимизировать по функциям $q_{k\rho}$, q_{kz} и $q_{k\varphi}$, вариационные уравнения для которых

$$\begin{aligned} \kappa^2 \partial_z (\rho b_{k\varphi}) = & \frac{k^2 \kappa^2 + \rho^2 f_0^2}{\rho} q_{k\rho} + \\ & + i \frac{k \kappa^2}{\rho} \partial_\rho (\rho q_{k\varphi}), \quad (49) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\kappa^2 \partial_\rho (\rho b_{k\varphi}) = & \frac{k^2 \kappa^2 + \rho^2 f_0^2}{\rho} q_{kz} + \\ & + i \frac{k \kappa^2}{\rho} \partial_z (\rho q_{k\varphi}), \quad (50) \end{aligned}$$

$$\kappa^2 \partial_\rho b_{kz} - \kappa^2 \partial_z b_{k\rho} = f_0^2 q_{k\varphi} + 2f_0 q_0 p_k. \quad (51)$$

Удобно ввести обозначения

$$Q_\rho = i \frac{k}{\rho} q_{k\rho}, \quad (52)$$

$$Q_z = i \frac{k}{\rho} q_{kz}, \quad (53)$$

$$t = \rho q_{k\varphi},$$

$$u = -i \frac{\rho}{k} b_{k\varphi},$$

и переписать (49)–(51) в виде

$$\partial_z u = \frac{1}{\rho} \partial_\rho t - \frac{1}{\tilde{\gamma}} Q_\rho, \quad (54)$$

$$-\partial_\rho u = \frac{1}{\rho} \partial_z t - \frac{1}{\tilde{\gamma}} Q_z, \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\gamma_2 \nabla t) &= \frac{f_0^2}{\varkappa^2 \rho^2} t + 2 \frac{f_0}{\varkappa^2 \rho} q_0 p_k + \\ &+ \frac{1}{\rho} (\partial_z \tilde{\gamma} \partial_\rho u - \partial_\rho \tilde{\gamma} \partial_z u), \end{aligned} \quad (56)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma} &= \frac{k^2 \varkappa^2}{k^2 \varkappa^2 + \rho^2 f_0^2}, \\ \gamma_2 &= (1 - \tilde{\gamma}) \rho^{-2} = \frac{f_0^2}{k^2 \varkappa^2 + \rho^2 f_0^2}. \end{aligned}$$

Обратим внимание на важное обстоятельство, связанное с непрерывностью возмущений $\delta \mathbf{q}_k$ и $\delta \mathbf{b}_k$ на границе образца. Компоненты векторного потенциала (52), (53) и их производные должны быть непрерывны на границе образца, а коэффициент $\tilde{\gamma}$ в (54), (55) испытывает скачек, поскольку вне образца $f_0 = 0$.

Выразим нормальную и касательную (в плоскости ρ, z) компоненты возмущения векторного потенциала на границе образца

$$Q_n = \tilde{\gamma} \left[\frac{1}{\rho} \partial_n t - \partial_l u \right], \quad (57)$$

$$Q_l = \tilde{\gamma} \left[\frac{1}{\rho} \partial_l t + \partial_n u \right]. \quad (58)$$

Из производных, входящих в правую часть этих уравнений, претерпевать скачек может только нормальная производная u . Отсюда следует, что на границе образца должно выполняться $Q_n = 0$, т.е.

$$\partial_n t = \rho \partial_l u, \quad (59)$$

что соответствует обращению в нуль нормальной компоненты возмущения тока.

Поскольку вне образца $\tilde{\gamma} = 1$, то из условия непрерывности Q_l можно вычислить величину скачка $\partial_n u$ на поверхности образца

$$\tilde{\gamma} \partial_n u_{int} - \partial_n u_{ext} = \gamma_2 \rho \partial_l t. \quad (60)$$

Условия (59) и (60) можно независимо получить приравнявая нулю вариацию (46) на поверхности шара.

Подставив (52)–(55) в (46), получим выражение для $\delta^2 E_k$,

$$\begin{aligned} \delta^2 E_k &= \int \rho d\rho \int dz \times \\ &\times \left\{ |\nabla p_k|^2 + |p_k|^2 \left(\mathbf{q}_0^2 + \frac{k^2}{\rho^2} - 1 + 3f_0^2 \right) + \right. \\ &+ 2 \frac{f_0}{\rho} q_0 (p_k^* t + p_k t^*) + \varkappa^2 \gamma_2 |\nabla t|^2 + \frac{f_0^2}{\rho^2} |t|^2 + \\ &\left. + \varkappa^2 \left[\tilde{\gamma} |\nabla u|^2 + \frac{k^2}{\rho^2} |u|^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (61)$$

из которого видно, что для вычисления устойчивости нет необходимости находить функции $q_{k\rho}$ и q_{kz} . Вместо этих двух функций достаточно вычислить только одну функцию u , уравнение для которой получается подстановкой (52)–(55) в (44)

$$\operatorname{div}(\tilde{\gamma} \nabla u) = \frac{k^2}{\rho^2} u + \frac{1}{\rho} (\partial_z \tilde{\gamma} \partial_\rho t - \partial_\rho \tilde{\gamma} \partial_z t). \quad (62)$$

Заметим, что это уравнение нельзя получить прямым варьированием (61), поскольку u определена с помощью (44) из минимизации (46) по $q_{k\rho}$, q_{kz} , и не является независимой функцией.

В итоге задача об устойчивости сверхпроводящего состояния сводится к определению знака наименьшего собственного значения E_k в краевой задаче

$$\begin{aligned} \Delta p_k &= p_k \left(\mathbf{q}_0^2 + \frac{k^2}{\rho^2} - 1 + 3f_0^2 - E_k \right) + \\ &+ 2 \frac{f_0}{\rho} q_0 t, \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\gamma_2 \nabla t) &= \frac{f_0^2}{\varkappa^2 \rho^2} t + 2 \frac{f_0}{\varkappa^2 \rho} q_0 p_k + \\ &+ \frac{1}{\rho} (\partial_z \tilde{\gamma} \partial_\rho u - \partial_\rho \tilde{\gamma} \partial_z u), \end{aligned}$$

$$\operatorname{div}(\tilde{\gamma} \nabla u) = \frac{k^2}{\rho^2} u + \frac{1}{\rho} (\partial_z \tilde{\gamma} \partial_\rho t - \partial_\rho \tilde{\gamma} \partial_z t)$$

с условиями (59), (60) и $\partial_n p_k = 0$ на границе образца.

Важным свойством (61) является то, что вне образца она зависит только от u . Действительно, вне образца $p_k = 0$, а все слагаемые с t содержат множитель $f_0 = 0$, и, следовательно, уравнение (56) вне образца выполняется для произвольной функции t . Поэтому вне образца система (63) сводится к единственному уравнению для u :

$$\Delta u = \frac{k^2}{\rho^2} u \quad (64)$$

с условиями $u(\rho, -z) = -u(\rho, z)$ и $u = 0$ при $r \rightarrow \infty$. Это уравнение Лапласа с азимутальным индексом k , решение которого выражается через присоединенные функции Лежандра. Уравнение (64) мы решаем численно, исходя из тех же соображений, что и при решении (20).

В численном счете, который также выполнен с помощью программы FlexPDE, при $0 < k < n$ мы пользуемся весовыми функциями

$$w_{k\rho} = w_{kz} = 0, \quad w_{k\varphi}(\rho, z) = \frac{\rho^2}{k^2} f_0^2. \quad (65)$$

Следует сказать, что вопрос об оптимальном выборе весовых функций $\{w_{k\alpha}\}$ остается открытым. Можно лишь отметить, что при $\rho \rightarrow 0$ используемое нами значение $w_{k\varphi}$ обеспечивает выполнение равенства

$$f_0 t = k p_k, \quad (66)$$

что значительно упрощает раскрытие неопределенностей вблизи оси образца.

С другой стороны, из равенства нулю сверхпроводящих токов (и их возмущений) вне образца следует, что и все $\{w_{k\alpha}\}$ вне образца должны обращаться в нуль. Таким образом, можно считать, что собственная функция существует только внутри образца, а вне образца во второй вариации энергии дополнительно присутствует интеграл от квадрата возмущения поля. Уравнение (48) превращается в

$$\begin{aligned} \delta^2 E_k(p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}) = \\ = E_k \iint_{r \leq r_s} \rho \, d\rho dz \left\{ |p_k|^2 + w_{k\varphi} |q_{k\varphi}|^2 \right\} + \\ + \kappa^2 \iint_{r \geq r_s} \rho \, d\rho dz |\delta \mathbf{b}_k|^2. \end{aligned} \quad (67)$$

Второй интеграл в этом выражении можно проинтегрировать по частям. С учетом соотношений (64) и (60) окончательно получим

$$\begin{aligned} \delta^2 E_k(p_k, q_{k\rho}, q_{k\varphi}, q_{kz}) = \\ = E_k \iint_{r \leq r_s} \rho \, d\rho dz \left\{ |p_k|^2 + w_{k\varphi} |q_{k\varphi}|^2 \right\} + \\ + \kappa^2 \oint_{r=r_s} dl \, \gamma_2 \rho^2 u \, \partial_t t. \end{aligned} \quad (68)$$

Теперь рассмотрим случай $k = 0$. Уже из определений (52), (53) видно, что этот случай является особым. Возвращаясь к минимизации (46), можно видеть, что при $k = 0$ исчезает связь между $q_{k\rho}, q_{kz}$

и $q_{k\varphi}$. Это приводит к тому, что минимуму (46) соответствует $q_{0\rho} = q_{0z} = u = 0$. Формально систему уравнений (63) можно оставить в том же виде, что и при $0 < k < n$, если положить $u = 0$ и $\gamma_2 = 1/\rho^2$ во всем пространстве. При этом уравнение для t нужно решать не только внутри образца, а во всем пространстве с граничным условием $t = 0$ при $r \rightarrow \infty$, что аналогично задаче (28) вычисления сверхпроводящего состояния. На границе образца в этом случае требуется лишь непрерывность t и ее производных. Укажем также, что при $k = 0$ в качестве весовой функции мы используем $w_{0\varphi}(\rho, z) = f_0^2$, при этом соотношение (66) превращается в $f_0 t = p_0$.

Следует сказать, что случай $k = 0$ обычно не представляет интереса из-за общих свойств решений уравнений Гинзбурга–Ландау. При заданном внешнем поле либо не существует нетривиальных решений, либо существуют два решения, одно из которых устойчиво (по отношению к гармонике $k = 0$), а другое неустойчиво. Отличить устойчивое решение от неустойчивого легко, поскольку энергия устойчивого состояния должна быть меньше, чем у неустойчивого. Кроме того, с увеличением внешнего поля у устойчивого решения параметр порядка уменьшается, а у неустойчивого — растет. При некотором внешнем поле эти два решения сливаются, и при дальнейшем увеличении поля нетривиальные решения не существуют.

Существование двух близких решений вблизи максимального (и минимального) поля является трудной ситуацией для любой программы численного счета. Поскольку в максимальном (и минимальном) поле $\delta^2 E_0$ обращается в нуль, то точное значение поля, в котором еще существует сверхпроводящее состояние с данным n , мы определяем из интерполяции $\delta^2 E_0$ между устойчивым и неустойчивым решениями.

Другой особый случай $k = n$ возникает из-за изменения особенности поведения собственной функции вблизи оси образца. Можно показать, что для любого k при $\rho \rightarrow 0$

$$p_k \propto \rho^{|n-k|}, \quad t \propto \rho^{|n-k|-n}, \quad u \propto \rho^k. \quad (69)$$

Степени ρ (как положительные, так и отрицательные) можно выделить с помощью замены

$$p_k = v_k f_0 \rho^{|n-k|-n}, \quad t = t_k \rho^{|n-k|-n}, \quad u = u_k \rho^k. \quad (70)$$

Определенные таким образом функции v_k, t_k и u_k не имеют особенностей при $\rho \rightarrow 0$ и позволяют решать задачу об устойчивости при произвольном k .

Изложенный выше метод определения устойчивости для сферических образцов можно естествен-

ным образом обобщить на цилиндрические образцы (ориентированные вдоль поля). Если положить отсутствие зависимостей от z для всех функций и равенство нулю размагничивающего фактора ($b_p = 0$, $b_{ext} = h_0$), то соотношения, полученные здесь, переходят в соответствующие выражения [4] для цилиндрического образца.

Как было сказано выше, устойчивые по отношению к малым возмущениям состояния должны иметь неотрицательную вторую вариацию энергии для всех гармоник возмущения. Для состояний с $n = 10$, изображенных на рис.1, область неотрицательной второй вариации энергии показана на рис.2.

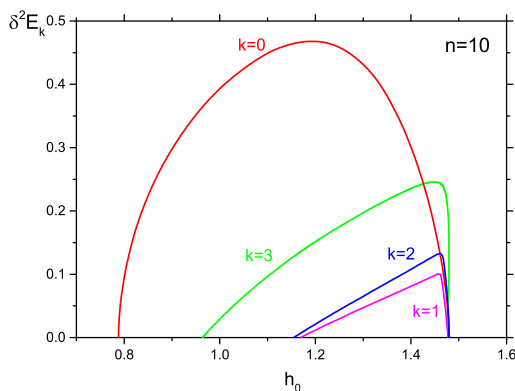


Рис. 2. Спектры устойчивости состояний, представленных на рис.1, для нескольких первых гармоник возмущения: $k = 0, 1, 2, 3$

Из рисунка видно, что для $n = 10$ условие устойчивости выполняется в области полей $1.18 \lesssim h_0 \lesssim 1.48$. При уменьшении поля ($h_0 < 1.18$) первой теряет устойчивость гармоника с $k = 1$. Это свойство, по-видимому, является общим для сверхпроводников с любым κ . Можно сказать, что магнитное поле выходит из образца по одному кванту. При увеличении поля картина потери устойчивости оказывается несколько сложнее. Для сверхпроводников I рода с $\kappa \ll 1$ потеря устойчивости происходит в поле $h_0 = h_{max}(n)$ при $k = 0$. Для сверхпроводников II рода с $\kappa > 1$ потеря устойчивости происходит в поле $h_0 \lesssim h_{max}(n)$ при $k = 1$. В промежуточном случае $\kappa \sim 1$ при малых n потеря устойчивости происходит при $k = 0$, а при больших $n \lesssim n_{max}$ — при $k = 1$. Возможно, что достаточным условием для потери устойчивости при $k = 1$ является существование в поле $h_0 \lesssim h_{max}(n)$ состояния ' $n+1$ '. Это предположение подводит к вопросу

о конечном состоянии, в которое перейдет состояние ' n ' при потере устойчивости. Очевидно, что в этом поле само конечное состояние должно быть устойчивым и иметь меньшую энергию. Если при заданном поле сравнивать энергию устойчивых состояний с разными значениями n , то состояние с наименьшей энергией будет абсолютно устойчивым, т.е. равновесным, а все остальные — метастабильными. Это значит, что при достаточно большой амплитуде возмущения метастабильное состояние может перейти в равновесное состояние или в другое метастабильное состояние с меньшей энергией.

Заметим, что в случае сверхпроводников II рода неустойчивость может развиваться в много-вихревое состояние [1], которое в линейном приближении можно представить как суперпозицию аксиально-симметричных решений. В настоящей работе такие состояния не изучаются, поскольку в нелинейной задаче, рассматриваемой здесь, суперпозиция аксиально-симметричных состояний решением не является. Можно, тем не менее, предположить, что поскольку в сверхпроводниках I рода энергия п-с границы положительна, то (по аналогии с массивными образцами) много-вихревые состояния будут невыгодными.

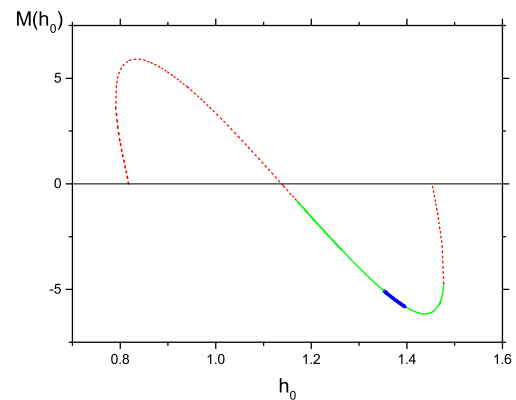


Рис. 3. Области устойчивости состояний с $n = 10$. Толстая кривая — равновесные состояния, тонкая кривая — метастабильные (устойчивые в малом) состояния, пунктирная кривая — абсолютно неустойчивые состояния

Таким образом, с точки зрения устойчивости на кривой намагничивания рис.1 можно выделить 3 типа состояний: равновесные, метастабильные и неустойчивые. Соответствующие области устойчивости показаны на рис.3. Неустойчивые состояния (пунктирная кривая) не реализуются никогда. Метастабильные (тонкая кривая) и равновесные (тол-

стая кривая) состояния являются устойчивыми и могут наблюдаться.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Результирующая кривая намагничивания для сферического образца, составленная из устойчивых состояний для всех допустимых значений $0 \leq n \leq 14$ показана на рис.4. Эта кривая заметно отличается от результата [4] для цилиндрического образца. Во-первых, в сферическом образце нет "парамагнитных" состояний, т.е. в сферическом образце для всех устойчивых состояний $M(h_0) \leq 0$. Во-вторых, минимальное поле, в котором существуют состояния с захваченным потоком, составляет $h_0 \approx h_{cM}$. Отметим, что в нулевом внешнем поле существуют решения с $0 \leq n \leq 5$, но среди них только майснеровское состояние является устойчивым.

Можно сказать, что состояния с захваченным потоком в сферическом образце менее устойчивы, чем в цилиндрическом. Такой результат легко объяснить, если обратить внимание, что при смещении области нормальной фазы от оси шара (что соответствует $k = 1$) уменьшается ее длина. А поскольку энергия единицы длины такого "вихря" положительна, то это смещение более эффективно понижает энергию в сферическом образце, чем в цилиндрическом, где подобного уменьшения длины нет.

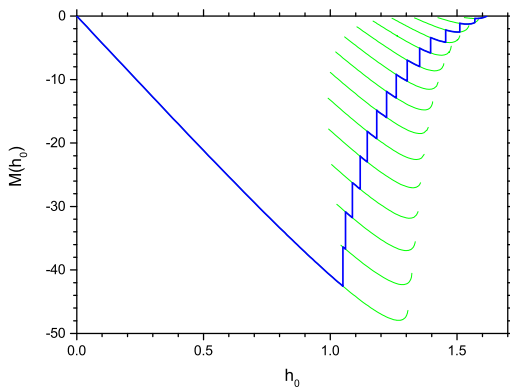


Рис. 4. Полная кривая намагничивания. Вертикальные линии обозначают границы равновесных состояний

От экспериментальных результатов [2] полученная кривая отличается существенно. Остановимся на двух ключевых отличиях. Первое заключается в наблюдении положительного магнитного момента в нулевом поле, которого, как показано в этой работе, теория Гинзбурга–Ландау не допускает.

Второе отличие состоит в наблюдении сверхпроводящих состояний выше T_c , чего также не может быть в рамках теории Гинзбурга–Ландау. Существование сверхпроводимости выше T_c означает, что в свободной энергии присутствуют дополнительные отрицательные слагаемые, которые выше T_c преобладают над положительной энергией Гинзбурга–Ландау.

Поэтому, полученную здесь кривую намагничивания следует рассматривать как результат применения к сферическим образцам теории Гинзбурга–Ландау в ее классической форме.

Среди возможных дополнительных слагаемых в свободной энергии, которые могут быть существенными для описания экспериментальных результатов, естественно рассмотреть энергию, связанную с поверхностью образца. Описание поверхности сверхпроводника в терминах поверхностной свободной энергии хорошо известно [7]. Здесь мы обсудим лишь самые общие свойства, следующие из граничных условий Де Жена [8].

5.1. Граничное условие Де Жена

Граничное условие на поверхности сверхпроводника (19), принятое в теории Гинзбурга–Ландау, является следствием результата, полученного Де Женом

$$\partial_R \Psi_s = -\frac{1}{L} \Psi_s, \quad (71)$$

где Ψ_s — значение параметра порядка на поверхности образца. Величина L для границы сверхпроводник–вакуум [8]

$$L \sim \frac{\xi_0^2}{a_0}, \quad (72)$$

где a_0 обозначает межатомное расстояние, а ξ_0 — длина когерентности при $T = 0$, роль которой в теории Гинзбурга–Ландау выполняет величина

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{g}{\alpha T_c}}. \quad (73)$$

Граничное условие Де Жена в приближении Гинзбурга–Ландау можно получить [7], сопоставив границе сверхпроводника дополнительную свободную энергию

$$F_s = \Lambda_s |\Psi_s|^2. \quad (74)$$

Величину Λ_s , соответствующую (71), в обозначениях (1) можно выразить как

$$\Lambda_s \sim a_0 \cdot \alpha T_c. \quad (75)$$

Обычно, L много больше размеров образца, поэтому естественно положить $L = \infty$ и, соответственно, $\Lambda_s = 0$, что и лежит в основе граничного условия (19) теории Гинзбурга–Ландау.

Отметим, что для теории Гинзбурга–Ландау важна не сама величина L , которая не зависит от температуры, а ее отношение к корреляционной длине $\xi(T)$, поэтому роль поверхностной энергии растет по мере приближения к T_c . Если перейти к безразмерным единицам этой работы и выразить поверхностную свободную энергию

$$E_s = \lambda_s |\psi_s|^2, \quad (76)$$

где

$$\lambda_s = \frac{\xi(T)}{L} \sim \frac{a_0}{\xi_0} \frac{1}{\sqrt{|\tau|}}, \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (77)$$

то можно видеть, что вблизи сверхпроводящего перехода существует характерная приведенная температура

$$\tau_s \sim \left(\frac{a_0}{\xi_0} \right)^2 \quad (78)$$

такая, что при $|\tau| \lesssim \tau_s$ поверхностной свободной энергией пренебрегать нельзя. Более того, если $\lambda_s < 0$, то отрицательная поверхностная свободная энергия понижает энергию сверхпроводящего состояния, и сверхпроводимость существует выше T_c .

Для классических сверхпроводников I рода сдвиг температуры перехода τ_s очень мал, но с ростом κ он увеличивается и, например, для свинца [2] составляет $\tau_s \approx 0.25 mK/T_c$.

Отметим, что из-за малости отношения a_0/ξ_0 в поверхностной свободной энергии необходимо также учитывать инварианты четвертой степени по Ψ_s [9], которые при $|\tau| \lesssim \tau_s$ могут иметь тот же порядок величины, что и (74). Граничные условия в этом случае определяются 4 параметрами, с помощью которых удастся аппроксимировать наблюдаемое поле неустойчивости нормальной фазы вблизи T_c .

Нужно заметить, что возмущения, приводящие к потере устойчивости, полученные в данной работе, сосредоточены вблизи n-s границы и, по-видимому, слабо чувствительны к условиям на поверхности образца. Поэтому нет оснований полагать, что учет поверхностной свободной энергии приведет к существенному изменению кривой намагничивания.

5.2. Дислокационная сверхпроводимость

Другой механизм, который может приводить к увеличению температуры сверхпроводящего перехода

да — это дислокационная сверхпроводимость [10]. Этот механизм также способствует удержанию магнитного потока в нулевом поле благодаря пиннингу вихрей на дислокациях. Отметим, что дислокационная сверхпроводимость должна проявляться на кривой намагничивания уже при небольшом количестве дислокаций, которые неизбежно присутствуют в образце, но еще не сказываются на других его свойствах. Поэтому дислокационная сверхпроводимость является хорошим кандидатом для описания экспериментальных результатов [2] и их отличия от результатов теории Гинзбурга–Ландау, полученных в данной работе.

Следует отметить, что существующая методика измерения магнитного момента не обладает пространственным разрешением, поэтому указать, связаны наблюдаемые эффекты с поверхностью образца или с дислокациями в его объеме, нельзя.

Благодарности. Автор выражает глубокую признательность В. И. Марченко за многочисленные полезные обсуждения. Также свою искреннюю благодарность автор выражает О. Р. Подоляк за помощь при работе над текстом статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. J. Baelus, D. Sun, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **75**, 174523 (2007).
2. И. Н. Хлюстиков, ЖЭТФ **149**, 378 (2016); И. Н. Хлюстиков, ЖЭТФ **159** (2021).
3. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Москва, ФМЛ (2000).
4. Е. Р. Подоляк, ЖЭТФ **153**, (2018).
5. <http://pdesolutions.com>
6. В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ **34**, 113 (1958).
7. Е. А. Андрюшин, В. Л. Гинзбург, А. П. Силин УФН **163**, 113 (1993).
8. П. де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).
9. Е. Р. Подоляк, ЖЭТФ **140**, 1185 (2011).
10. Е. Р. Подоляк, ЖЭТФ **156(1)**, 118 (2019).

ОБРАЗОВАНИЕ, ДИФфуЗИЯ И РОСТ ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ ПУЗЫРЬКОВ В γ -УРАНЕ ПРИ ИЗБЫТКЕ МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ: СВЯЗЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И КИНЕТИКИ

Е. А. Лобашев^{a,b*}, А. С. Антропов^{a,b**}, В. В. Стегайлов^{a,b,c}

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

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

^c Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”
101000, Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 августа 2022 г.,
после переработки 14 сентября 2022 г.
Принята к публикации 18 октября 2022 г.

Для описания эволюции ядерных топлив важным процессом является образование газонаполненных наноразмерных пузырьков в результате объединения отдельных продуктов деления урана. Теоретическое описание этого процесса связано со значительными трудностями, так как требует учета в рамках единой модели как динамики отдельных атомов в решетке, так и кинетики эволюции ансамбля пузырьков. В данной статье описана попытка построить такую модель, основанную на молекулярно-динамических (МД) расчетах для пузырьков ксенона в ОЦК-уране в случае избытка междоузельных атомов в кристаллической матрице. Анализ основан на МД-моделировании неравновесного процесса образования нанопузырьков ксенона из отдельных атомов Хе, растворенных в кристаллической матрице. Проанализировано соотношение размера пузырьков и числа атомов газа в них, а также зависимость коэффициента диффузии пузырьков от их радиуса и числа междоузельных атомов в матрице γ -U. Предложена кинетическая модель эволюции ансамбля пузырьков, позволяющая описать результаты МД-расчетов и экстраполировать их на большие времена.

DOI: 10.31857/S0044451023020074

EDN: OQNPWL

1. ВВЕДЕНИЕ

Детальное понимание механизмов выхода газообразных продуктов деления (преимущественно ксенона) из ядерных топлив для математического моделирования этого процесса представляет собой важную современную научно-техническую проблему [1, 2]. С качественной точки зрения эти процессы аналогичны процессам транспорта гелия в металлах, которые изучаются для конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов [3]. При этом, конечно, конкретные механизмы диффузии

газа и нуклеации пузырьков различаются из-за существенного различия в размерах атомов газа.

Ключевым этапом выхода газа из материала является его выход на границы зерен. На движение газа к границам зерен могут влиять следующие процессы [3]: диффузия атомов газа в матрице, образование и рост пузырьков за счет поглощения вакансий или испускания междоузельных атомов, поглощение газа пузырьками и перерастворение газа, а также два механизма слияния пузырьков — миграция и коалесценция и созревание по Оствальду (последний механизм играет роль при высоких температурах и низких концентрациях газа).

Многие вычислительные подходы учитывают только диффузию атомов газа в матрице, захват (trapping) атомов газа неподвижными пузырьками и перерастворение (resolution) атомов газа из пузырьков в матрицу в результате воздействия трещин осколков деления [4, 5]. Игнорирование иных ме-

* E-mail: lobashev.ea@phystech.edu

** E-mail: antropov@phystech.edu

ханизмов выхода газа из объема зерен материала топлива обусловлено, вообще говоря, как нехваткой экспериментальных данных, так и сложностью теоретического описания соответствующих процессов. Так, например, зачастую используется упрощенное описание, согласно которому в результате перерастворения появляются пузырьки одинакового размера, хотя имеются указания на то, что учет распределения пузырьков по размерам может повысить точность подобных моделей [6].

Некоторые топливные коды (например, код MFPR, разрабатывающийся в ИБРАЭ РАН [7]) явно включают в математическую модель миграцию и коалесценцию пузырьков. В этом случае отдельного внимания заслуживают коэффициенты диффузии газонаполненных пузырьков.

Для отдельных задач, связанных с поведением газовых пузырьков, были предложены аналитические решения. В работах Рязанова, Волкова и Воскобойникова была разработана общая теория образования пузырьков в перенасыщенных растворах вакансий, междоузельных атомов и атомов газа [8–10]. В частности, было показано, что высокая плотность газа в пузырьках заметно снижает размер критического зародыша и барьер его образования [8]. На основе этого результата в работе Реста [11] был проанализирован механизм нуклеации газовых пузырьков одновременно из нескольких атомов газа (в противоположность общепризнанному ранее двухатомному механизму). В работе Нуаро показана связь равновесных концентраций газа в пузырьке с его размером и концентрациями дефектов в объеме матрицы [12]. Вещуновым и Шестаком была разработана детальная теория диффузии газонаполненных пузырьков в диоксиде урана [13].

Важной подзадачей является изучение транспорта газа в объеме матрицы без радиационного стимулирования (т. е. при отсутствии в материале трещин осколков деления атомов урана). В этом случае радиационное перерастворение газа перестает играть роль и определяющей становится диффузия пузырьков. В такой постановке результаты теоретических расчетов можно сравнить с результатами экспериментов по выходу газа из облученного материала при отжиге, как, например, в [14]. И в этом случае вопрос о скорости выхода газа из топлива также нельзя считать решенным. В работе Эванса [15] указывается на то, что выход газа из объема зерна происходит гораздо быстрее, чем это предсказывают теоретические модели. Там же предполагается, что ускоренный выход газа связан с движением пузырьков в поле градиента концентрации вакан-

сий. Однако результаты Верма с соавторами [14] по расчету скорости выхода ксенона из диоксида урана в рамках многомасштабной модели, учитывающей ускоренное движение пузырьков в градиенте концентрации вакансий [15], показывают очень значительные расхождения с результатами специально поставленных экспериментов.

С помощью разработанного ранее метода неравновесной молекулярной динамики (МД) для моделирования диффузии пузырьков [16, 17] недавно нами были получены результаты [18] для диоксида урана, свидетельствующие о существовании механизмов сверхбыстрой диффузии газонаполненных нанопузырьков, которые пока не учитываются в топливных кодах.

Как было указано в работе [19], эволюция популяции пузырьков через миграцию и коалесценцию подчиняется уравнениям, схожим с таковыми для коагуляции коллоидных частиц и может быть описана моделью Чандрасекара [20].

МД-моделирование активно используется для исследования поведения пузырьков Хе в UO_2 . Мур с соавторами в работе [21] установили, что кластер атомов Хе формируется из отдельных атомов Хе, занимающих вакансии Шоттки, чему способствует пересыщение вакансий Шоттки в UO_2 . Мерфи с соавторами в работе [22] изучали свободную энергию Хе в точечных дефектах и пузырьках в UO_2 . Джелла с соавторами [23] также изучали поведение пузырьков Хе в UO_2 и их влияние на набухание топлива. Лиу с соавторами [24] моделировали нуклеацию пузырьков ксенона и гелия в UO_2 . Кинетика роста ксеноновых пузырьков в диоксиде урана и испускание ими дислокационных петель изучалось методом МД в [25]. Другим методом моделирования развития газовой пористости в материалах является метод фазового поля [26], к которому, однако, нужно относиться как к качественному методу.

Концентрации Хе в пузырьках радиусом 2–500 нм были экспериментально измерены [27] и оказались выше равновесных значений, что можно объяснить механизмом испускания дислокационных петель при росте пузырьков [28]. Поэтому отдельный интерес представляет рост пузырьков в условиях избыточной концентрации междоузельных атомов.

Обсуждаемые механизмы гораздо меньше исследованы в других видах топлива. Металлическое топливо UMo — один из перспективных кандидатов на роль топлива для реакторов на быстрых нейтронах. Пузырьки ксенона в сплаве UMo уже исследовались методами атомистического моделирования [29, 30], однако в них не рассматривались начальные этапы

формирования пузырьков. Экспериментальная работа [31] по наблюдению пузырьков, образующихся при бомбардировке монокристалла молибдена ионами ксенона дала возможность верифицировать модели диффузии ксенона в молибдене [32] (в данной модели ключевая роль отводилась радиационно стимулированной диффузии). В работе [33] моделировалась нуклеация пузырьков ксенона в молибдене из растворенных атомов газа, находящихся в вакансиях. В этой работе было показано наличие пороговой концентрации ксенона, необходимой для образования пузырьков, а также механизм ускорения диффузии вакансий вблизи пузырька.

В данной работе рассматривается чистый ОЦК-уран как прототип топлива УМо. Особенностью ОЦК-урана является аномально низкая энергия образования междоузельных атомов [34] и их преимущественная роль в самодиффузии. Это приводит, например, к необычному механизму диффузии нанополостей [17]. Методами классической молекулярной динамики моделируется эволюция газовых пузырьков в решетке ОЦК-урана из растворенных в ней атомов ксенона. Обсуждаются как термодинамические характеристики равновесной популяции пузырьков, так и кинетика их объединения и роста. В разд. 2 описываются условия моделирования. В разд. 3 рассматривается связь между размерами пузырьков, количеством атомов ксенона в них и концентрацией точечных дефектов. В разд. 4 вычисляются коэффициенты диффузии пузырьков небольших размеров. В разд. 5 рассматривается теоретическая модель эволюции популяции газовых пузырьков, основанная на подходе Чандрасекара [20] и предсказания этой модели сравниваются с результатами моделирования.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

В работе проводилось моделирование эволюции решетки урана с растворенными в ней в начальный момент атомами ксенона. Был использован ЕАМ-потенциал для системы U–Mo–Xe [35]. Этот потенциал был разработан для моделирования процессов с участием ксенона в сплаве U–Mo и уже прошел апробацию в исследованиях различных научных групп (см., например, [30, 36–39]). Модель хорошо описывает и свойства чистых U, Mo и Xe. Хотя активно развивающиеся в настоящее время машинно-обучаемые и нейросетевые модели потенциалов для многокомпонентных систем [40, 41] обес-

печивают зачастую более высокую точность, их вычислительная сложность на 1–2 порядка выше.

Начальное состояние системы — ОЦК-решетка из атомов урана, представляющая собой куб со стороной 20 постоянных решетки. Из решетки удалялись атомы урана (с номерами, выбранными по случайному принципу), чтобы обеспечить некоторую начальную концентрацию вакансий, а также в случайных положениях размещались атомы ксенона (после этого проводилась минимизация энергии системы). Наиболее интересные результаты удалось получить для 127 атомов ксенона. Система приводилась к состоянию равновесия в течение 1 ns при помощи термостата Нозе–Гувера при температуре 1400 K и нулевом давлении. Такая температура была выбрана из методических соображений: при больших температурах происходит плавление, а при меньших диффузия происходит медленнее. Несмотря на то, что некоторые атомы урана были удалены из решетки, в системе сразу в начале МД-расчета появлялись междоузельные атомы. Это связано с тем, что атомы ксенона вытесняли атомы урана в междоузельные положения и занимали их место за время порядка 10 ps (энергия образования междоузельных атомов U меньше, чем междоузельных атомов Xe, поэтому междоузельные атомы Xe в расчетах не наблюдались). За это же время группы из 2–7 атомов ксенона, начальные положения которых оказались рядом, сформировали пузырьки.

Часть появившихся междоузельных атомов аннигилировала со свободными вакансиями, поэтому количество междоузельных атомов в начальный момент времени примерно равно количеству атомов ксенона минус начальное количество вакансий. Наиболее подробно был изучен случай с 67 начальными вакансиями, потому что в этом случае концентрация междоузельных атомов после релаксации оказывается близка к равновесной при данной температуре, а именно $127 - 67 = 60$ атомов на ячейку.

Также были проведены расчеты, в которых начальное количество вакансий было выше (до 257). В этом случае даже после того, как атомы ксенона вытеснили атомы урана, свободных вакансий осталось больше, чем междоузельных атомов.

Вакансии и междоузельные атомы определялись в пакете OVITO [42] (рассматривались ячейки Вигнера–Зейтца, окружающие идеальные положения узлов решетки, вакансией считалась ячейка, в которой не было атомов, а междоузельным атомом — ячейка, в которой находились два атома).

Далее система рассчитывалась в NVE-ансамбле с шагом 1 fs. Постоянная решетки $a = 3.555 \text{ \AA}$

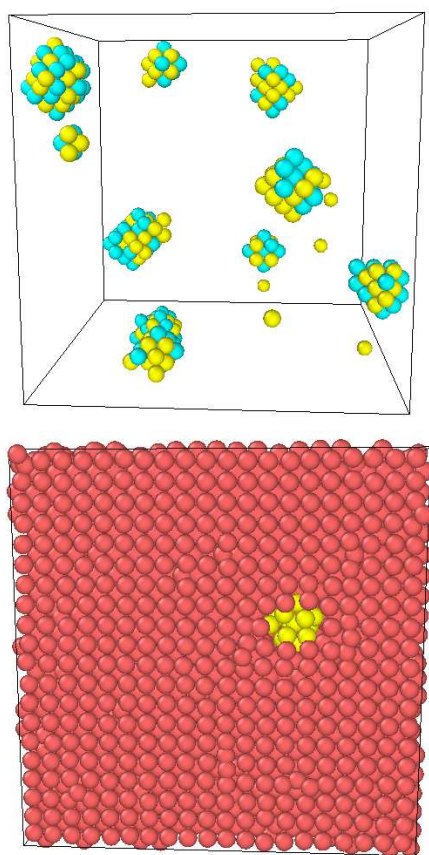


Рис. 1. Моделируемая система после 30 нс МД-расчета. На верхней картинке показаны все атомы (красные — U, желтые — Xe), а на нижней — результат анализа той же структуры (атомы урана не показаны). Голубым цветом обозначены пустые вакансии, желтым — вакансии, внутри которых содержится атом ксенона

соответствует нулевому давлению при температуре 1400 К. Моделирование проводилось в течение 100 нс. Для системы с 67 вакансиями было рассчитано 20 траекторий по 100 нс каждая (траектории различаются только направлениями скоростей атомов в начальный момент времени, что достаточно для стохастизации, приводящей к их статистической независимости [43]). Для анализа методом Вигнера–Зейтца было необходимо избавиться от слишком больших тепловых колебаний, поэтому положения атомов усреднялись по 1000 МД-шагам (рис. 1). В рассматриваемой МД-модели за 100 нс давление и температура в системе меняются незначительно (давление возрастает примерно до 6000 бар, а температура поднимается на 80 К). Расчеты проводились с помощью программного комплекса LAMMPS [44] на суперкомпьютере “Десмос” в ОИВТ РАН [45].

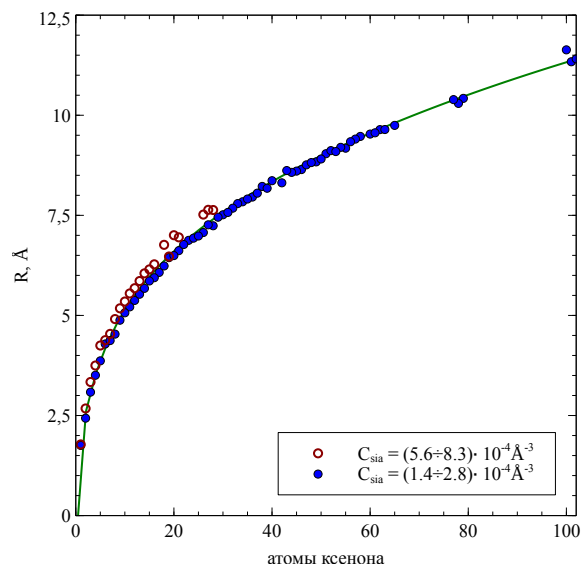


Рис. 2. Зависимость радиуса пузырька от количества атомов ксенона n для двух концентраций междоузельных атомов урана. Линия соответствует формулам (2) и (1)

Была рассмотрена гипотеза, что размер пузырька для фиксированного n (n — число атомов Хе в пузырьке) может зависеть от концентрации междоузельных атомов C_{sia} (self-interstitial atoms), которая существенно меняется со временем. Поэтому сначала рассматривались только пузырьки, существовавшие в начале моделирования, а потом только существовавшие в конце (два набора данных на рис. 2). Рассмотренные в работе значения концентраций междоузельных атомов C_{sia} соответствуют отношениям концентрации C_{sia} к концентрации атомов урана (равной $440 \cdot 10^{-4} \text{ Å}^{-3}$) порядка 0.003–0.02. По полученному графику можно сделать вывод, что зависимость размера пузырьков от концентрации газа практически не меняется при изменении концентрации междоузельных атомов урана.

Для пузырьков размера $n = 5$ и более атомов ксенона количество вакансий, приходящихся на один атом ксенона, практически не зависит от размера и равно примерно 2.7 (здесь мы называем объемом вакансии объем одной ячейки Вигнера–Зейца ОЦК-фазы урана). А для меньших пузырьков это отношение меньше (рис. 3), например, пузырек с одним атомом ксенона состоит из одной вакансии. Таким образом, зависимость количества вакансий, составляющих пузырек, от количества атомов ксенона может быть приближенно описана эмпирической формулой

$$N_{vac}/n = (2.7 - 2.1 \exp(-0.27n)). \quad (1)$$

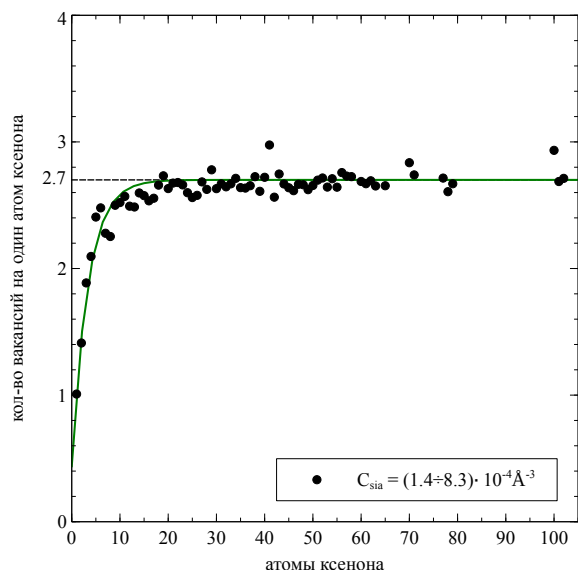


Рис. 3. Количество вакансий, приходящихся на один атом ксенона, для пузырьков различного размера. Линия соответствует формуле (1)

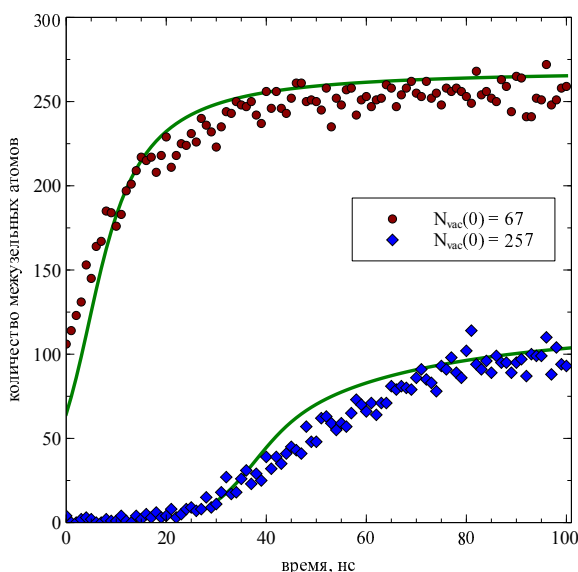


Рис. 4. Зависимость количества междоузельных атомов от времени. Кривыми показаны зависимости, полученные в результате решения кинетической модели (уравнения (20) и (22))

В результате того, что в больших пузырьках на один атом ксенона приходится больше вакансий, при объединении пузырьков некоторые атомы урана вытесняются в междоузельные положения. Этим и объясняется зависимость концентрации междоузельных атомов от времени, показанная на рис. 4.

3. СВОЙСТВА ПОПУЛЯЦИИ ПУЗЫРЬКОВ

3.1. Соотношение размера пузырьков и числа атомов газа

Сразу после термостатирования большинство атомов ксенона находилось в виде атомов замещения в решетке; после этого они начали объединяться в пузырьки. Процессы перехода атомов Хе между пузырьками (созревание по Оствальду) в данной системе практически не наблюдались.

На рис. 4 показано, что число междоузельных атомов урана растет с течением времени в результате укрупнения газовых пузырьков.

Для всех пузырьков, содержащих одинаковое количество атомов ксенона, было найдено среднее количество вакансий N_{vac} , составляющих их. На рис. 2 показана зависимость эффективного радиуса пузырька от количества атомов ксенона. За радиус был принят радиус шара, объем которого равен суммарному объему вакансий:

$$R = a \left(\frac{3N_{vac}}{8\pi} \right)^{1/3}. \quad (2)$$

Отдельно стоит сказать про расчеты с повышенной начальной концентрацией вакансий. Выше было сказано, что даже после того, как атомы ксенона вытесняют атомы урана в междоузельные положения, в системе остаются свободные вакансии. Оказалось, что в таких расчетах все свободные вакансии почти сразу объединялись с пузырьками, и в системе все равно появлялось некоторое количество междоузельных атомов. При этом количество вакансий на атом ксенона в пузырьке было больше, чем получается по формуле (1). Но через некоторое время в результате объединения пузырьков количество вакансий на атом ксенона достигло такого же значения (т.е. в некотором смысле произошло “насыщение” пузырьков), и после этого концентрация междоузельных атомов начала расти, как в предыдущем случае (рис. 4).

3.2. Давление газа в пузырьках

В континуальном пределе зависимость равновесного давления газа в пузырьке от его радиуса определяется формулой Лапласа

$$P = \frac{2\gamma}{R}, \quad (3)$$

где γ — коэффициент поверхностного натяжения. В связи с тем, что пузырьки находятся в кристаллической матрице, следует также учесть поправку,

связанную с выдавливанием газом междоузельных атомов (или дислокационных петель, представляющих собой кластеры из нескольких междоузельных атомов, имеющих форму плоских “дисков”) [46]:

$$P = \frac{2\gamma}{R} + \frac{E_{i/l}}{V_{i/l}}, \quad (4)$$

где $E_{i/l}$ — энергия образования междоузельного атома или дислокационной петли, а $V_{i/l}$ — соответствующий объем, освобождающийся при их испускании.

Для твердого вещества нет простого способа определения коэффициента поверхностного натяжения, но для количественного анализа нам будет достаточно оценки. Согласно [47] для ОЦК- и ГЦК-решеток при нулевой температуре есть универсальная связь между энергией атома в решетке E_{coh} и коэффициентом поверхностного натяжения (выраженного в эВ/атом)

$$\gamma(0) = 0.134E_{coh}. \quad (5)$$

Для ОЦК-урана в рамках используемой модели потенциала ЕАМ было рассчитано, что $E_{coh} = 4.147$ эВ/атом.

В [48] предлагается следующая зависимость поверхностного натяжения от температуры:

$$\gamma(T) = \gamma(0) - TS, \quad (6)$$

где принимается энтропийный вклад $S = 1.0k_B$.

Согласно формулам (5) и (6) $\gamma = 0.049$ эВ/Å² (переход от эВ/атом к эВ/Å² делается с использованием средней площади, приходящейся на атом поверхности пузырька). Кривая, описываемая формулой (3), показана на рис. 5.

Для того чтобы сравнить результаты молекулярной динамики с формулами (3) и (4), необходимо знать зависимость давления ксенона от концентрации (плотности). Для этого была проведена серия МД-расчетов ячейки с чистым ксеноном (2000 атомов). Получено, что

$$P = a_{Xe} C^{b_{Xe}}, \quad (7)$$

где C — концентрация ксенона в Å⁻³, $a_{Xe} = 2.54 \cdot 10^{10}$ бар, $b_{Xe} = 3.38$. Эта оценка достаточно точно выполняется в диапазоне $C = (0.015-0.033)$ Å⁻³. Концентрация определялась как

$$C = \frac{3n}{4\pi R^3}. \quad (8)$$

На рис. 5 показаны точки, полученные по формулам (7) и (8).

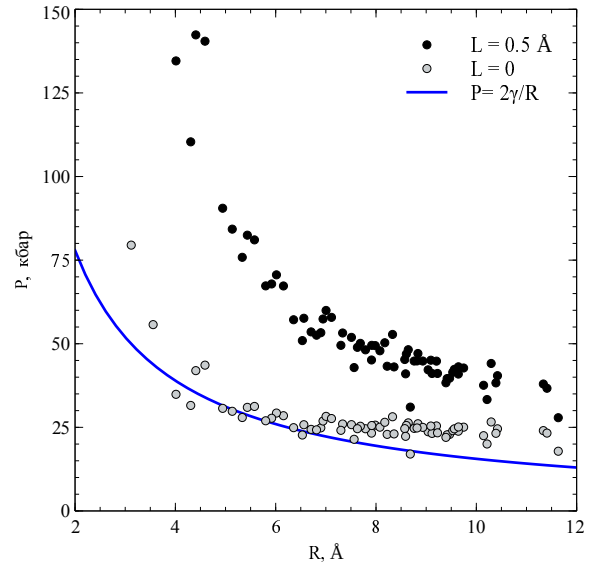


Рис. 5. Зависимость давления ксенона от его концентрации. Линия определяется формулой (3), точки соответствуют данным МД и соотношениям (8) и (9)

Можно также учесть, что эффективный радиус пузырька, использующийся для расчета концентрации газа в нем, может отличаться от определения (2). Из-за того, что среднее расстояние U–Xe несколько больше, чем среднее расстояние U–U, целесообразно ввести поправку на объем пузырька для расчета концентрации газа в нем. Толщина соответствующего “исключенного слоя” может быть оценена как $L = 0.5$ Å при помощи сравнения функций радиального распределения U–U и U–Xe. Тогда в формуле (8) R следует заменить на $(R - L)$:

$$C = \frac{3n}{4\pi(R - L)^3}. \quad (9)$$

Точки, рассчитанные с этой поправкой, также изображены на рис. 5.

Видно, что серые точки ($L = 0$) на рис. 5 выходят на константу $P = 25$ кбар. Можно ожидать, что черные точки ($L = 0.5$ Å) выйдут на ту же константу, только при больших радиусах $R \gg L$. Если предположить механизм роста пузырьков за счет испускания одиночных междоузлий, то асимптотическое давление должно составлять $E_i/(a^3/2) \sim 50$ кбар, где $E_i \sim 0.7$ эВ [34], $a^3/2$ — атомный объем U в ОЦК-матрице. Таким образом, асимптотическое давление газа в пузырьках в МД-модели оказывается примерно в два раза ниже, чем если бы пузырек расширялся за счет одиночных междоузлий. При испускании дислокационных петель энергия образования E_l дислокационной петли из N_l междоузлий может

быть ниже, чем $N_l E_i$, за счет изменения энергии междоузлий при объединении их в дислокационную петлю. Однако оценить эту энергию намного сложнее, чем энергию образования междоузельного атома E_i .

4. ДИФФУЗИЯ ПУЗЫРЬКОВ

Для параметризации кинетической модели, описывающей рост пузырьков (см. разд. 5), необходимо определить коэффициенты диффузии пузырьков различного размера. Было принято, что коэффициент диффузии пропорционален концентрации междоузельных атомов [18]. Для проверки этого предположения была отдельно рассчитана зависимость коэффициента диффузии пузырька из 10 атомов от концентрации междоузельных атомов. Ячейка со стороной 10 постоянных решетки с единственным пузырьком моделировалась в течение 260 нс. Начальная концентрация междоузлий варьировалась в расчетах, в процессе моделирования она точно определялась методом Вигнера–Зейтца и усреднялась за все время моделирования. Остальные параметры были такими же, как в основных 20 расчетах. На рис. 6 показаны полученные зависимости (для ясности отметим, что $1 \text{ \AA}^2/\text{нс} = 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$). Предположение о пропорциональной зависимости оказывается разумным, хотя для некоторых размеров наблюдаются существенные отклонения от нее.

Таким образом, мы можем вычислять не сам коэффициент диффузии, а отношение D/C_{sia} .

Расчет коэффициента диффузии газовых пузырьков проводился по тем же 20 траекториям следующим образом. Для каждого пузырька было найдено смещение за 1 нс (если за это время он не объединился с другим пузырьком), коэффициент диффузии был определен по формуле

$$D = \frac{\langle \Delta r^2 \rangle}{6\Delta t} \quad (10)$$

и нормирован на среднюю концентрацию междоузельных атомов на протяжении данной одной наносекунды. На рис. 7 показана зависимость среднего квадрата смещения пузырька от времени.

Получившиеся значения коэффициента диффузии показаны на рис. 8. Минимумы около $n = 7$ и $n = 25$ атомов объясняются правильной геометрической формой соответствующих пузырьков (рис. 9). Для пузырьков из 30 и более атомов Хе коэффициенты диффузии были рассчитаны с меньшей точностью, поэтому для них они были приближены асимптотической зависимостью. Можно ожидать,

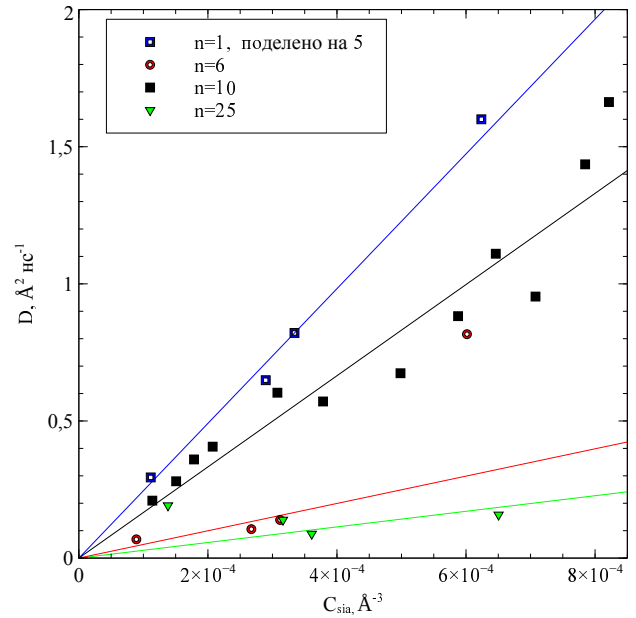


Рис. 6. Зависимость коэффициента диффузии пузырьков различного размера от концентрации междоузельных атомов урана

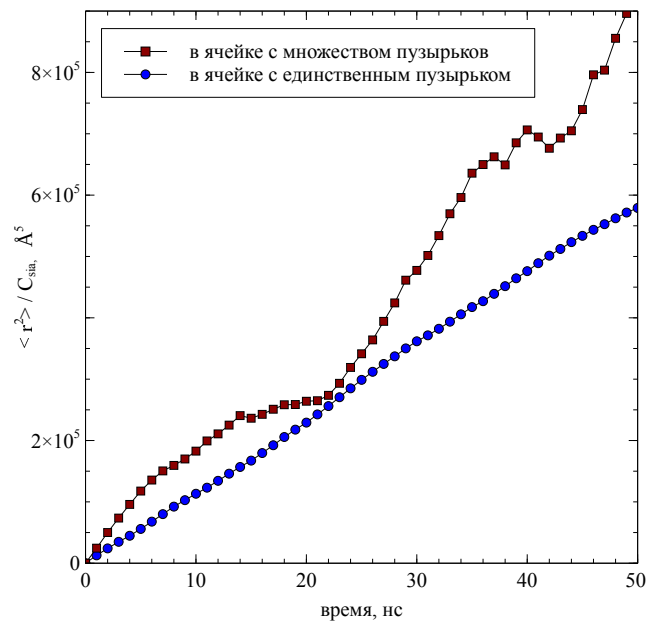


Рис. 7. Средний квадрат смещения пузырька из 10 атомов, деленный на концентрацию междоузельных атомов, в зависимости от времени. Для сравнения приведен также график, полученный в результате моделирования ячейки с одним пузырьком

что для больших пузырьков $D \propto R^{-3} \propto n^{-1}$ или $D \propto R^{-4} \propto n^{-4/3}$ в зависимости от механизма диффузии (объемный или поверхностный соответственно [13]). По полученным МД-данным невозможно

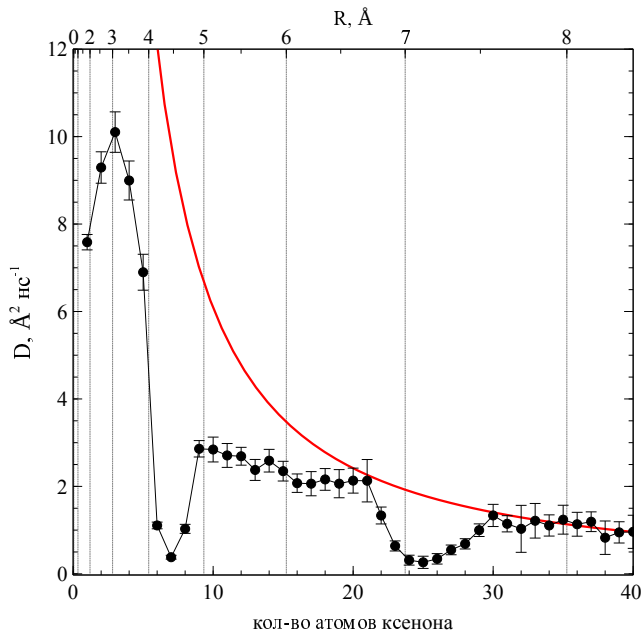


Рис. 8. Зависимость коэффициента диффузии от размера при концентрации междоузельных атомов $6.9 \cdot 10^{-4} \text{ Å}^{-3}$. Коэффициент диффузии при любой другой концентрации можно получить, учитывая, что $D \propto C_{sia}$

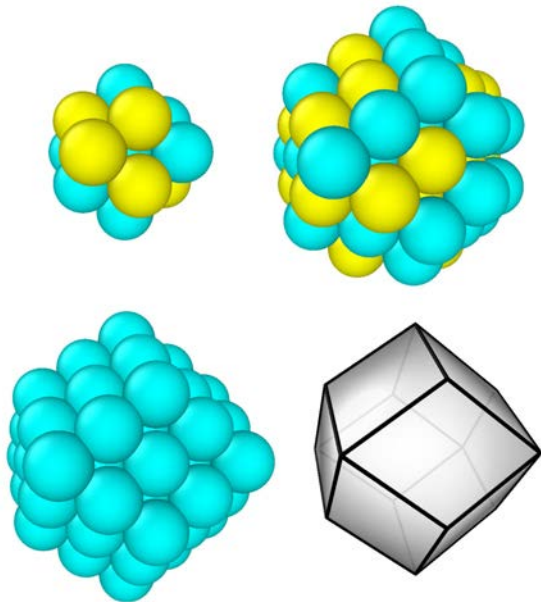


Рис. 9. Сверху: пузырьки из 15 вакансий (7 атомов ксенона) и 62 вакансий (25 атомов ксенона). Снизу: идеальный пузырек из 65 вакансий и изображение ромбического додекаэдра для сравнения

однозначно определить, какой из этих механизмов преобладает в данном случае, так как они примерно с одинаковой точностью описывают зависимость $D(n)$ при $n \geq 30$. Поэтому были проведены расчеты

для обоих случаев. Для поверхностного механизма асимптотика была приближена следующей формулой:

$$\frac{D}{C_{sia}} = \frac{190000}{n^{4/3}} \left(\frac{A^5}{\text{нс}} \right), \quad n \geq 30, \quad (11)$$

а для объемного — следующей:

$$\frac{D}{C_{sia}} = \frac{49000}{n} \left(\frac{A^5}{\text{нс}} \right), \quad n \geq 30. \quad (12)$$

5. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

5.1. Формулировка модели

В данном разделе описывается модель диффузии и нуклеации пузырьков, основанная на подходе Чандрасекара [20]. В работе [20] рассматривается модель для коллоидных частиц в растворе, мы же используем аналогичный математический подход для газовых пузырьков.

Будем считать, что пузырьки не взаимодействуют, находясь на расстояниях больше R , а сблизившись на это расстояние, они мгновенно объединяются в один.

Сначала будем рассматривать один неподвижный пузырек размера n , находящийся в начале координат, вокруг которого равномерно распределены пузырьки одинакового размера m с начальной концентрацией C_m . Если решить уравнение диффузии

$$\frac{dC}{dt} = D \Delta C \quad (13)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} C = C_m, & |r| > R, & t = 0, \\ C = 0, & |r| = R, & t > 0, \end{cases} \quad (14)$$

то получится следующее:

$$C = C_m \left(r - R + R \cdot \text{erf} \left(\frac{r - R}{\sqrt{Dt}} \right) \right). \quad (15)$$

Отсюда частота объединения такого пузырька с остальными будет равна

$$J = 4\pi R^2 D \frac{dC}{dr} \Big|_{r=R} = 4\pi D R C_m \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\pi D t}} \right), \quad (16)$$

где вторым слагаемым обычно можно пренебречь, если рассматривается достаточно большой отрезок времени:

$$t \gg \frac{D}{R^2}. \quad (17)$$

Если учесть, что рассматриваемый пузырек тоже может двигаться, то в формуле (16) вместо D будет коэффициент взаимной диффузии

$$D_{nm} = D_n + D_m. \quad (18)$$

Теперь можно записать частоту объединений пузырьков двух размеров:

$$J_{nm} = 4\pi(D_n + D_m)R_{nm}C_nC_m \quad (19)$$

и искомую систему кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dC_n}{dt} = & -4\pi C_n \sum_j C_m R_{nm} D_{nm} + \\ & + 4\pi \sum_{m+k=n} C_m C_k R_{mk} D_{mk}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь первое слагаемое означает исчезновение пузырьков размера n за счет объединения с другими, а второе — появление пузырьков размера n за счет объединения меньших пузырьков, сумма размеров которых равна n .

На основе наших расчетов можно проверить точность этой модели для ксенона в уране и найти оптимальные параметры в модели.

5.2. Параметризация, проверка и применение модели

В качестве радиуса объединения было выбрано

$$R_{nm} = R_n + R_m + b, \quad (21)$$

где $b = 6 \text{ \AA}$ было подобрано таким образом, чтобы средний размер пузырька через 20 нс после начала расчета совпадал с результатами моделирования. Радиус R_n определялся по формулам (2) и (1).

Для решения уравнений (20) был использован метод Рунге–Кутты 4-го порядка. Учитывались пузырьки размером до 240 атомов. Было принято, что в начальный момент весь ксенон находится в пузырьках из одного атома (т. е. отдельные атомы Хе в позициях замещения в узлах ОЦК-решетки).

В кинетические уравнения входит коэффициент диффузии, а он зависит от концентрации междоузельных атомов. Она рассчитывалась как

$$C_{sia} = -C_{vac}(0) + \frac{2}{a^3} \sum_i \frac{4\pi}{3} R_i^3, \quad (22)$$

где R_i — радиус i -го пузырька, $a^3/2$ — объем, приходящийся в решетке на один атом. Таким образом, количество междоузельных атомов определяется суммарным количеством вакансий, образующих

пузырьки, а также начальной концентрацией вакансий.

Результаты решения кинетических уравнений и результаты моделирования показаны на рис. 10. Для определения количества и размеров пузырьков в моделировании за пузырек считался кластер атомов ксенона, т. е. группа атомов, находящихся друг от друга на расстояниях не более $4 \text{ \AA}$. Концентрация пузырьков находилась как количество пузырьков в ячейке, деленное на ее объем, т. е. на $3.6 \cdot 10^5 \text{ \AA}^3$. Сравнение результатов МД-расчетов (усредненных по 20 траекториям) и результатов кинетической модели показывает, что кинетическая модель обеспечивает адекватное описание МД-данных.

Преимущество кинетической модели в том, что с ее помощью можно рассчитывать распределение газовых пузырьков по размерам на временах, существенно превышающих времена, доступные прямым МД-расчетам. В качестве примера был проведен расчет, предсказывающий распределение по размерам через одну микросекунду после начала расчета (рис. 11). Поскольку в системе при этом преобладают пузырьки больших размеров, для которых коэффициенты диффузии определяются с помощью асимптотической аппроксимации, были рассмотрены оба варианта аппроксимации ($D \propto R^{-3}$ и $D \propto R^{-4}$). Рис. 11 показывает, что на масштабе 1 мкс зависимость от выбора асимптотики невелика (влияние заметнее на больших временах). Можно заметить, что распределение, предсказанное кинетической моделью для времени 1 мкс, имеет пики около пузырьков с низким коэффициентом диффузии.

На рис. 12 показано, как менялась концентрация пузырьков некоторых размеров в течение 1000 нс. Видно, что имеет место максимум концентрации для пузырьков каждого размера.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотренный в работе относительно небольшой размер МД-модели был ориентирован на повышение физического времени в МД-расчетах. Высокая начальная концентрация растворенного в ОЦК-урани ксенона позволила ускорить процесс образования пузырьков и уменьшить времена ожидания их последующего взаимодействия, что облегчает получение кинетической информации из МД [49]. Вообще говоря, в дальнейшем планируется рассмотреть вопрос влияния начальной концентрации газа. Современные суперкомпьютерные системы да-

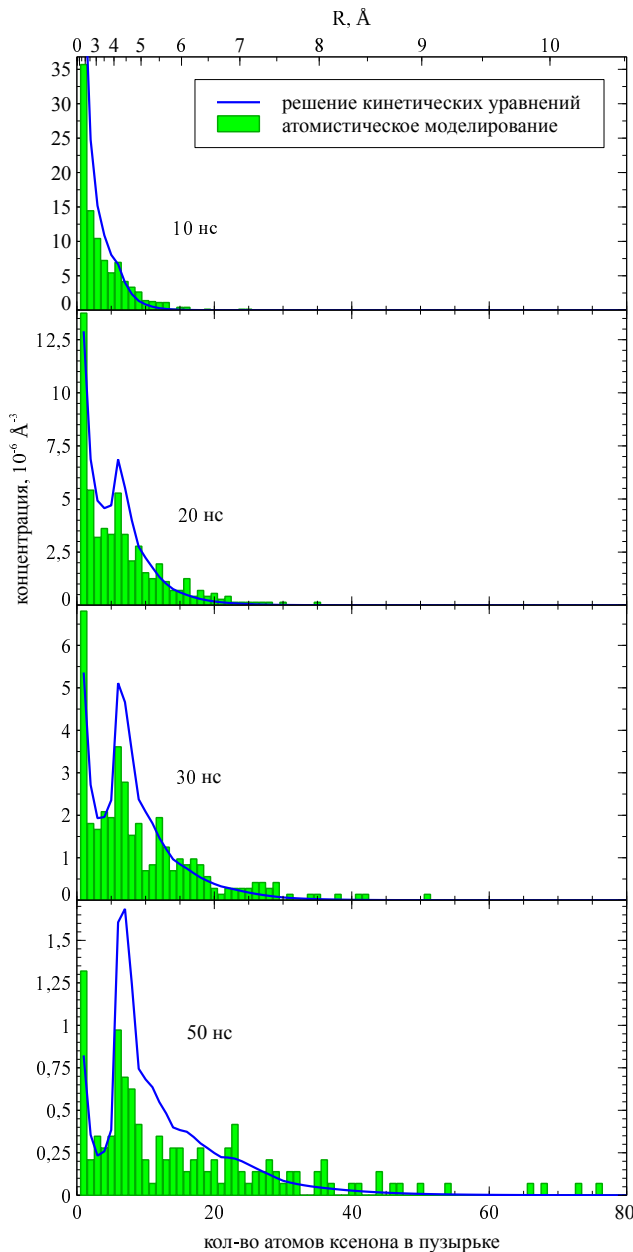


Рис. 10. Распределение пузырьков по размерам в различные моменты времени для 20 траекторий

ют возможность моделировать МД-модели из десятков миллионов атомов с аналогичными ЕАМ-потенциалами на сотни наносекунд [50], особенно с использованием графических ускорителей [51, 52].

На первый взгляд, рассмотренная в данной работе ситуация избытка междоузельных атомов является достаточно специальным случаем неравновесной концентрации точечных дефектов, который может реализовываться только в особых условиях (например, под облучением). Однако именно

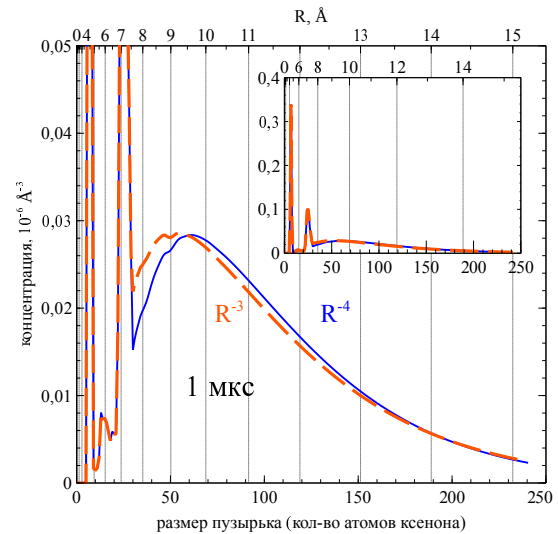


Рис. 11. Распределение пузырьков по размерам через 1 мкс после начала расчета, полученное решением кинетических уравнений

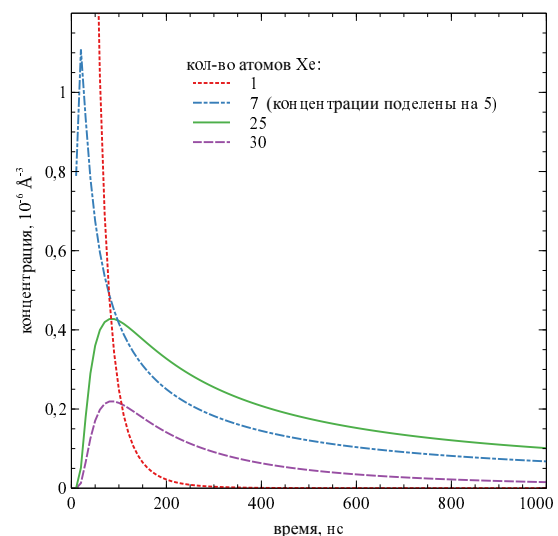


Рис. 12. Изменение концентрации пузырьков с 1, 7, 25 и 30 атомами Хе в течение 1000 нс

для γ -U характерна anomalно низкая энергия образования междоузельных атомов $E_i \sim 0.7$ эВ и, соответственно, anomalно высокая равновесная концентрация междоузельных атомов [34]. Следует отметить, что эта особенность γ -U не позволяет применять для описания газовых пузырьков в γ -U общую теорию [8–10], разработанную в приближении (справедливом для большинства металлов), что равновесная концентрация междоузельных атомов намного меньше, чем концентрация вакансий.

Детальный анализ давления газа в пузырьках показал, что на рассмотренных в работе МД-

траекториях в газовых пузырьках всех размеров, начиная с наименьших, давление газа выше равновесного лапласовского давления. Хотя существование пересжатых (over-pressurized) газовых пузырьков в топливе U–Mo описано в литературе (см., например, [53]), информации о механизме формирования таких пузырьков и давлении газа в них все еще недостаточно. Интересным результатом данной работы является существование асимптотики соотношения числа вакансий, составляющих пузырек, к числу атомов газа в нем, N_{vac}/n , для пузырьков небольшого размера ($R < 1$ нм), начиная с $n \sim 20$. В недавней работе Билера с соавторами [37] были рассмотрены более крупные пузырьки ксенона размером 3–8.5 нм в сплаве U–Mo (в рамках точно такой же модели межатомного потенциала [35], что используется в этой работе), и авторы делают заключение о возрастании соотношения N_{vac}/n для пузырьков этих размеров. Асимптотическое значение давления 25 кбар $\sim E_i/a^3$ в пузырьках, рассмотренных нами в данной работе, может быть объяснено механизмом выдавливания давлением газа комплексов междоузельных атомов урана с поверхности пузырька в объем ОЦК-матрицы. Детали подобного механизма требуют специального исследования, аналогичного, например, работе по МД-анализу испускания дислокационных петель содержащими гелий нанометровыми пузырьками в вольфраме [54].

Для того чтобы применить разработанную модель к системе с избыточной концентрацией вакансий, необходимо решить ряд вопросов. Во-первых, предположение о том, что коэффициент диффузии пропорционален концентрации междоузельных атомов, не позволяет проводить расчеты при нулевой концентрации междоузельных атомов. Во-вторых, при низких концентрациях междоузельных атомов важно учитывать зависимость соотношения N_{vac}/n не только от n , но и от C_{sia} . На рис. 4 для случая с 257 начальными вакансиями решение было построено, только начиная с момента 30 нс, так как до этого момента концентрация междоузельных атомов была слишком мала. Кроме того, для описания случая с пониженной концентрацией междоузельных атомов соотношение (1) потребовало уточнения.

Результаты данной работы свидетельствуют об определяющей роли междоузельных атомов в диффузии пересжатых газонаполненных пузырьков, что говорит об универсальности подобного механизма, уже обнаруженного нами недавно в диоксиде урана [18]. Наличие междоузельных атомов в приповерхностном слое газовых пузырьков существенно

облегчает перестройку поверхности пузырьков, что обеспечивает колоссальное (на порядки) ускорение скорости диффузии пузырьков в кристаллической матрице. Нами установлен факт пропорциональности $D \propto C_{sia}$ для большинства размеров газовых пузырьков.

В то же время результаты работы показывают, что маленькие пузырьки с определенным числом атомов газа ($n = 7$ и $n = 25$) демонстрируют аномально низкую скорость диффузии. Причина этого состоит в особенной регулярной форме подобных пузырьков, соответствующей правильным многогранникам, в результате чего сильно снижается число подвижных поверхностных атомов и, следовательно, эффективно снижается и поверхностная самодиффузия, обеспечивающая диффузию пузырьков. Некоторые причины несферичности полостей в ОЦК-металлах были недавно проанализированы в работе Назарова с соавторами [55]. Низкая подвижность пузырьков указанных размеров обеспечивает их высокую концентрацию на больших временах, что демонстрирует решение кинетической модели, параметризованной по МД-данным. Наличие высокой концентрации подобных малоподвижных сверхмалых пузырьков может быть важно с точки зрения интерпретации экспериментальных данных и построения моделей выхода газа из топлива. Отметим, что наличие большого числа подобных пузырьков может ускользать из рассмотрения, поскольку предел разрешения основного экспериментального метода анализа пузырьков — просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ) — соответствует 1 нм.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализирована модель образования газовых нанопузырьков из ксенона, растворенного в матрице ОЦК-урана при избытке междоузельных атомов. Показано, что для пузырьков размером $R \sim 5\text{--}10$ Å ($n = 20\text{--}100$ атомов Xe) характерна одинаковая концентрация газа. Соответствующее максимальное предельное давление газа заметно выше равновесного лапласовского и определяется механизмом выдавливания газом атомов урана с поверхности пузырька в объем ОЦК-матрицы.

Получены коэффициенты диффузии пузырьков в рассмотренном диапазоне размеров. Оказалось, что зависимость коэффициента диффузии от размера для пузырьков из 1–30 атомов имеет существенно немонотонный вид. Обнаружено существование

малоподвижных пузырьков, форма которых соответствует форме правильных многогранников. Показано, что коэффициенты диффузии для пузырьков большинства рассмотренных размеров пропорциональны концентрации междоузельных атомов в ОЦК-матрице.

Построена кинетическая модель, описывающая эволюцию функции распределения пузырьков по размерам. Решение этой модели для времени в 1 мкс, что в 10 раз больше времени рассмотренных МД-расчетов, показывает длительное сохранение популяции малоподвижных пузырьков в матрице.

Расчеты выполнены с использованием Суперкомпьютера “Десмос” СКЦ ОИВТ РАН.

Финансирование. Исследование осуществлено при частичной финансовой поддержке в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Tonks, D. Andersson, R. Devanathan, R. Dubourg, A. El-Azab, M. Freyss, F. Iglesias, K. Kulacsy, G. Pastore, S. R. Phillpot et al., *J. Nucl. Materials* **504**, 300 (2018).
2. J. Rest, M. Cooper, J. Spino, J. Turnbull, P. Van Uffelen, and C. Walker, *J. Nucl. Materials* **513**, 310 (2019).
3. H. Trinkaus and B. Singh, *J. Nucl. Materials* **323**, 229 (2003).
4. G. Pastore, D. Pizzocri, C. Rabiti, T. Barani, P. Van Uffelen, and L. Luzzi, *J. Nucl. Materials* **509**, 687 (2018).
5. Z. Qian, W. Liu, R. Yu, Y. Tao, D. Yun, and L. Gu, *J. Nucl. Materials* **556**, 53188 (2021).
6. D. Olander and D. Wongsawaeng, *J. Nucl. Materials* **354**, 94 (2006).
7. M. Veshchunov, V. Ozrin, V. Shestak, V. Tarasov, R. Dubourg, and G. Nicaise, *Nucl. Eng. and Design* **236**, 179 (2006).
8. A. Volkov and A. Ryazanov, *J. Nucl. Materials* **273**, 155 (1999).
9. R. E. Voskoboinikov and A. E. Volkov, *J. Nucl. Materials* **282**, 66 (2000).
10. R. E. Voskoboinikov and A. E. Volkov, *J. Nucl. Materials* **297**, 262 (2001).
11. J. Rest, *J. Nucl. Materials* **402**, 179 (2010).
12. L. Noirot, *J. Nucl. Materials* **447**, 166 (2014).
13. M. Veshchunov and V. Shestak, *J. Nucl. Materials* **376**, 174 (2008).
14. L. Verma, L. Noirot, and P. Maugis, *J. Nucl. Materials* **528**, 151874 (2020).
15. J. Evans, *J. Nucl. Materials* **210**, 21 (1994).
16. А. С. Антропов, В. Д. Озрин, В. В. Стегайлов, В. И. Тарасов, *ЖЭТФ* **156**, 125 (2019).
17. A. Antropov and V. Stegailov, *J. Nucl. Materials* **533**, 152110 (2020).
18. A. Antropov and V. Stegailov, *J. Nucl. Materials* **551**, 152942 (2021).
19. E. Gruber, *J. Appl. Phys.* **38**, 243 (1967).
20. S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 59 (1943).
21. E. Moore, L. R. Corrales, T. Desai, and R. Devanathan, *J. Nucl. Materials* **419**, 140 (2011).
22. S. Murphy, A. Chartier, L. Van Brutzel, and J.-P. Crocombette, *Phys. Rev. B* **85**, 144102 (2012).
23. A. Jelea, R.-M. Pellenq, and F. Ribeiro, *J. Nucl. Materials* **444**, 153 (2014).
24. X.-Y. Liu and D. Andersson, *J. Nucl. Materials* **462**, 8 2015
25. L. Yang and B. Wirth, *J. Nucl. Materials* **544**, 152730 (2021).
26. Z. Xiao, Y. Wang, S. Hu, Y. Li, and S.-Q. Shi, *Comp. Mat. Sci.* **184**, 109867 (2020).
27. K. Nogita and K. Une, *Nucl. Inst. and Met. in Phys. Res. Sec. B: Beam Interact. with Mat. and Atoms* **141**, 481 1998
28. G. Greenwood, A. Foreman, and D. Rimmer, *J. Nucl. Materials* **1**, 305 1959
29. H. Xiao, C. Long, X. Tian, and S. Li, *Mat. and Design* **74**, 55 2015
30. S. Hu, W. Setyawan, V. V. Joshi, and C. A. Lavender, *J. Nucl. Materials* **490**, 49 2017
31. D. Yun, M. A. Kirk, P. M. Baldo, J. Rest, A. M. Yacout, and Z. Z. Insepov, *J. Nucl. Materials* **437**, 240 2013
32. D. Yun, J. Rest, W. Zhang, X. Xie, W. Liu, and L. Gu, *J. Nucl. Materials* **540**, 152409 (2020).
33. W. Zhang, D. Yun, and W. Liu, *Materials* **12**, 2354 (2019).

34. G. Smirnov and V. Stegailov, *J. Phys.: Cond. Mat.* **31**, 235704 (2019).
35. D. E. Smirnova, A. Y. Kuksin, S. V. Starikov, V. V. Stegailov, Z. Insepov, J. Rest, and A. M. Yacout, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **21**, 035011 (2013).
36. D. Yun, Y. Miao, R. Xu, Z. Mei, K. Mo, W. Mohamed, B. Ye, M. J. Pellin, and A. M. Yacout, *J. Nucl. Materials* **471**, 272 (2016).
37. B. Beeler, S. Hu, Y. Zhang, and Y. Gao, *J. Nucl. Materials* **530**, 151961 (2020).
38. B. Beeler, M. W. Cooper, Z.-G. Mei, D. Schwen, and Y. Zhang, *J. Nucl. Materials* **543**, 152568 (2021).
39. J. French and X.-M. Bai, *J. Nucl. Materials* **565**, 153744 (2022).
40. I. Novoselov, A. Yanilkin, A. Shapeev, and E. Podryabinkin, *Comp. Mat. Sci.* **164**, 46 (2019).
41. R. Ryltsev and N. Chtchelkatchev, *J. Mol. Liq.* **349**, 118181 (2022).
42. A. Stukowski, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 015012 (2010).
43. Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, *Мат. Мод.* **24**, 3 (2012).
44. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen et al., *Computer Physics Communications* **271**, 108171 (2022).
45. A. Shamsutdinov, M. Khalilov, T. Ismagilov, A. Piryugin, S. Biryukov, V. Stegailov, and A. Timofeev, in *International Conference on Mathematical Modeling and Supercomputer Technologies* (Springer, 2020), p. 401.
46. W. Jäger, R. Mancke, H. Trinkaus, G. Crecelius, R. Zeller, J. Fink, and H. Bay, *J. Nucl. Materials* **111**, 674 (1982).
47. M. Methfessel, D. Hennig, and M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **46**, 4816 (1992).
48. W. Tyson, *Canadian Metal. Quart.* **14**, 307 (1975).
49. Z. Insepov, J. Rest, A. Yacout, A. Y. Kuksin, G. Norman, V. Stegailov, S. Starikov, and A. Yanilkin, *J. Nucl. Materials* **425**, 41 (2012).
50. V. V. Dremov, P. V. Chirkov, and A. V. Karavaev, *Sci. Rep.* **11**, 1 (2021).
51. D. Seitov, K. Nekrasov, A. Y. Kupryazhkin, S. Gupta, and A. Usseinov, *Phys. Res. Sec. B* **476**, 26 (2020).
52. N. Kondratyuk, V. Nikolskiy, D. Pavlov, and V. Stegailov, *Int. J. High Perf. Comp. Appl.* **35**, 312 (2021).
53. A. Leenaers, W. Van Renterghem, and S. Van den Berghe, *J. Nucl. Materials* **476**, 218 (2016).
54. H. Xie, N. Gao, K. Xu, G.-H. Lu, T. Yu, and F. Yin, *Acta Materialia* **141**, 10 (2017).
55. A. V. Nazarov, A. A. Mikheev, and A. P. Melnikov, *J. Nucl. Materials* **532**, 152067 (2020).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОМПЛЕКСОВ ОДНОИОННЫХ МАГНИТОВ $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})] \cdot 4\text{CHCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ МИКРОЧАСТИЦАМИ

О. В. Коплак^{a,b}, Е. В. Дворецкая^{a,b}, Е. И. Кунцына^a, Р. Б. Моргунов^{a*}

^a Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^b Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 сентября 2022 г.,
после переработки 10 сентября 2022 г.
Принята к публикации 10 октября 2022 г.

Представлен новый метод управления спиновой релаксацией в одномолекулярных магнитах (SMM) с целью устранения спиновой декогеренции до уровня, приемлемого для квантовых вычислений с частотой релаксации порядка 10^2 Гц при температуре 2 К. Значительная часть SMM имеет быструю магнитную релаксацию, протекающую по нескольким параллельным каналам, чувствительным к наличию внешнего магнитного поля. Подавление части каналов релаксации в таких материалах (их также называют одноионные магниты, SIM) обычно достигается с помощью электромагнита в макроскопических объемах комплексов. Это неприемлемо для использования отдельных комплексов SIM в качестве кубитов и заставляет искать пути реализации локального магнитного поля и других типов взаимодействий комплексов в специально подобранной среде, обеспечивающей зеемановское взаимодействие в отсутствие внешнего поля. В статье показано, что композит из комплексов SIM с ионами Er^{3+} и ферромагнитных микрочастиц проявляет остаточную намагниченность в объеме, достаточную для уменьшения частоты спиновой релаксации. По величине этот эффект конкурирует с известным эффектом гибридизации орбиталей комплекса при взаимодействии с поверхностью металла. Поэтому микроstructuring массива комплексов в ферромагнитной матрице может быть использовано для создания локальных областей с регулируемой частотой магнитной релаксации.

DOI: 10.31857/S0044451023020086
EDN: OQOMNH

1. ВВЕДЕНИЕ

Очевидные успехи химического дизайна одномолекулярных магнитов (SMM) [1–4] пока не превратили их в готовый прибор и до сих пор не привели к получению кубитов, спиновых переключателей или других устройств, использующих квантовые состояния одиночных ионов металлов. Хотя физические модели внутриатомных электронных переходов, учитывающие энергию одноионной анизотропии и электронную структуру энергетических уровней в таких соединениях, разработаны на самом вы-

соком квантово-механическом уровне, и имеются работы, моделирующие квантовые операции в таких молекулах [5–7], реализация ячейки памяти или логического устройства на основе отдельных молекулярных комплексов сильно затруднена. Это связано с тем, что в результате сложной цепочки химических реакций, которые задают структуру комплекса SMM и соответствующее поле лигандов, симметрию окружения иона и другие требуемые характеристики, получается макроскопическое количество кристаллитов с размерами около 1–10 мкм. Получившийся порошок, как правило, диэлектрик, не позволяет селективно обращаться к отдельным комплексам, записывать и считывать информацию с них. Поэтому одной из задач реализации практического применения таких комплексов является организация массива комплексов внутри некоторой матри-

* E-mail: spintronics2022@yandex.ru

цы, которая позволяет обходиться без внешнего поля. В такой матрице можно создавать микро- или нанодорожки с индивидуальными свойствами комплексов вокруг них и индивидуальной внутренней намагниченностью. Примером подобной инженерии может служить система, состоящая из сверхпроводника и молекулярного магнетика, в которой магнитное поле, создаваемое сверхпроводником на его поверхности, затормаживает спиновую релаксацию в комплексах [8]. Имеются и аналогичные работы с ферромагнетиками, в которых остаточное поле намагниченности ферромагнетика устраняет квантовое туннелирование спина в комплексах Co^{2+} , чем значительно уменьшает частоту спиновой релаксации [9].

Нужно отметить, что до работ [8,9] зеемановское взаимодействие внутри образца считалось пренебрежимо малым [10,11]. В качестве основного механизма влияния на спиновую релаксацию в комплексах металлов принималась спин-орбитальная гибридизация комплексов, вызванная установлением химической связи между органическими лигандами комплекса и кислородом на окисленной поверхности металлов [12,13]. Этот механизм влияния металлической поверхности на спиновую релаксацию комплексов, расположенных на этой поверхности, действительно существует во многих системах и должен приниматься в расчет при конструировании наноразмерных ячеек памяти на литографически созданной поверхности металла с отдельными наночайками. Поскольку в большинстве случаев в экспериментах использовались немагнитные переходные металлы Pt, Cu, Au, при расчете зеемановского взаимодействия принималось во внимание лишь диполь-дипольное взаимодействие между спинами комплексов [14]. Поскольку в кристаллической решетке молекулярного кристалла расстояния между ионами металлов велики, около 1–3 нм, магнитное диполь-дипольное взаимодействие между ними действительно имеет порядок 0.1 К и мало на что способно влиять.

Однако в работе [9] было показано, что введение намагниченных микрочастиц в микрокристаллический порошок молекулярных комплексов приводит к значительному влиянию зеемановского взаимодействия на скорость магнитной релаксации в SIM, блокируя квантовое туннелирование и затормаживая релаксацию спинов до желаемых частот порядка 10^2 Гц.

Отметим, что одноионные магнетики (SIM) отличаются от SMM только тем, что в таких комплексах спиновая релаксация протекает быстрее,

поэтому она недоступна для измерения СКВИД-магнитометром и не соответствует условиям квантовой декогеренции, необходимым для квантовых расчетов. Однако приложение магнитного поля частично блокирует спиновую релаксацию в SIM и сдвигает частоту релаксации до желаемого значения порядка $1\text{--}10^3$ Гц.

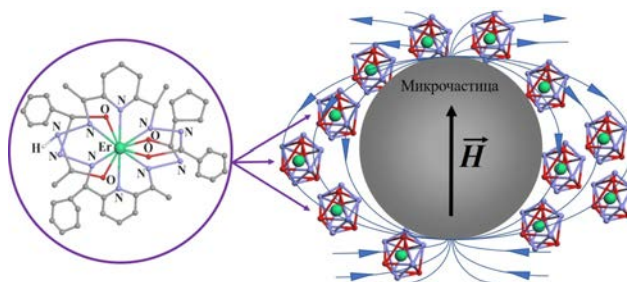


Рис. 1. Определенная в работе [15] атомная структура комплекса $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})] \cdot 4\text{CHCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и микрочастица PrDyFeCoB , покрытая комплексами эрбия, находящимися в ее поле рассеяния

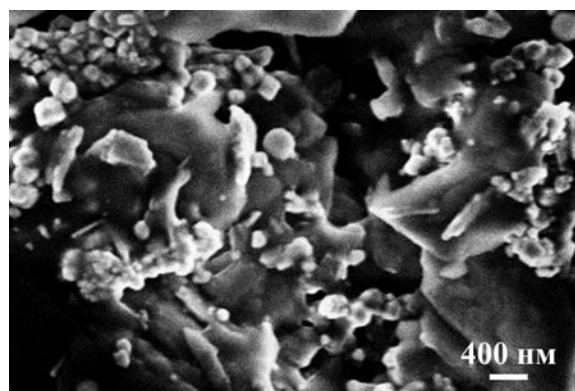
В этой работе мы создали композит, аналогичный тому, который был исследован в работе [9], однако рабочее тело композита (комплексы SIM) было создано на основе комплексов с ионом Er^{3+} (рис. 1). Структура, химический состав, длины связей, магнитные свойства комплексов в отсутствие микрочастиц были детально исследованы в [15]. Измерение полевых зависимостей намагниченности при разных температурах позволило получить параметры спин-гамильтониана и параметры расщепления уровней в кристаллическом поле лигандов в комплексе [15]. Магнитные измерения в переменном поле выявили индуцированное полем поведение SIM-комплекса эрбия с потенциальным барьером $U_{\text{eff}} = 87$ К при внешнем поле 1500 Э [15]. Магнитная релаксация в нулевом внешнем поле при $T = 2$ К была столь быстрой в этом соединении, что ее частота была выше, чем частотный диапазон СКВИД-магнитометра (до 1400 Гц) и установки PPMS (до 10 кГц) [15]. Поскольку ионы Er^{3+} обладают уникальными оптическими свойствами и внутриионные переходы могут быть легко зарегистрированы по флуоресценции этих ионов [16,17], они кажутся весьма перспективными для разработки приборов квантовых вычислений.

Цель настоящей работы заключалась в установлении каналов спиновой релаксации в одноионных магнитах на основе Er^{3+} , а также в обнаружении и определении тех из каналов, которые ускоряют или замедляют магнитную релаксацию при взаимодействии комплексов с поверхностью ферромагнитных

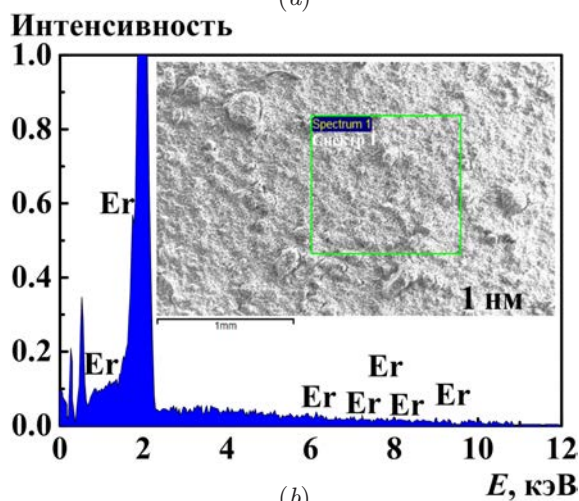
микрочастиц и в установлении физических механизмов изменения низкотемпературной спиновой динамики в комплексах, распределенных в ферромагнитной матрице. Кроме того, целью работы было создание условий для замедления магнитной релаксации комплексов до значений, доступных для измерения в СКВИД-магнитометре при 2 К.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА

В экспериментах использовался нейтральный комплекс лантанидов с химической формулой $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})] \cdot 4\text{CHCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$, в котором ион Er^{3+} был окружен кольцами (N_3O_2) и лигандами L (2,6-бис(фенилгидразон)пиридин), обеспечивающими симметричную координацию с группами NO (рис. 1). Кристаллическая решетка молекулярного кристалла соответствует пространственной группе $P2_12_12_1$ [15]. Полное описание химического синтеза, кристаллической структуры и атомной структуры индивидуального комплекса, включая межатомные длины, представлены в [15].



(a)



(b)

Рис. 2. СЭМ-изображения чистого комплекса Er (a) и элементный состав комплекса (b) с указанием области проведения анализа EDX на вставке

Локальный химический состав образца и картирование химических элементов определялись методом энергодисперсионного рентгеноструктурного анализа (EDX) в сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) SUPRA 25 (Zeiss). Фазовый анализ выполнялся на Superprobe-733 (JEOL), оснащенном анализатором Inca Energy EDX. Площадь анализируемого участка составляла 1 мкм^2 . Глубина проникновения рентгеновского излучения составляла около 1 мкм. На рис. 2 a показана морфология порошка комплекса. На рис. 2 b показан спектр EDX и соответствующий участок поверхности прессованного комплекса без микрочастиц (рис. 2 b, врезка), на котором был выполнен химический анализ прессованного материала.

Микрочастицы (МЧ) $\text{Pr}_{16}\text{Dy}_{17}\text{Fe}_{42}\text{Co}_{24}\text{B}_1$ получались методом распыления расплава в потоке аргона. После кристаллизации капля средним размером 10 мкм получившиеся МЧ были использованы для создания композита. Композитный материал прессовался в таблетки под давлением при концентрациях 85 об.% микрочастиц и 15 об.% порошкового комплекса. Для проверки также был изготовлен образец с 20 об.% комплекса. Это соотношение было нами подобрано в результате оптимизации полезного сигнала магнитной восприимчивости комплексов эрбия в композите. Объемные концентрации комплексов SIM и МЧ должны быть подобраны таким образом, чтобы внутреннее магнитное поле было приблизительно одинаковым везде, где находятся комплексы, т. е. тонкий слой порошка SIM должен покрывать МЧ, а распределение МЧ по размерам должно быть узким. Аттестация химического состава таблетки позволяет оценить среднее расстояние между ферромагнитными МЧ — около 10 мкм, убедиться в целостности микрочастиц, подтвердить однородное распределение комплекса Er^{3+} между МЧ и оценить атомные доли элементов. Ряд изображений СЭМ и EDX, характеризующих прессованный композит МЧ с порошком SIM, представлены, соответственно, на рис. 3 и 4.

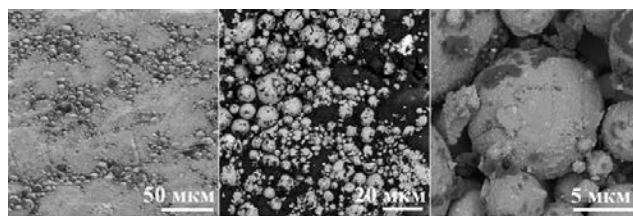


Рис. 3. СЭМ-изображения различных участков композитного материала на основе комплекса Er и микрочастиц PrDyFeCoB , полученные на микроскопе Tescan Solaris

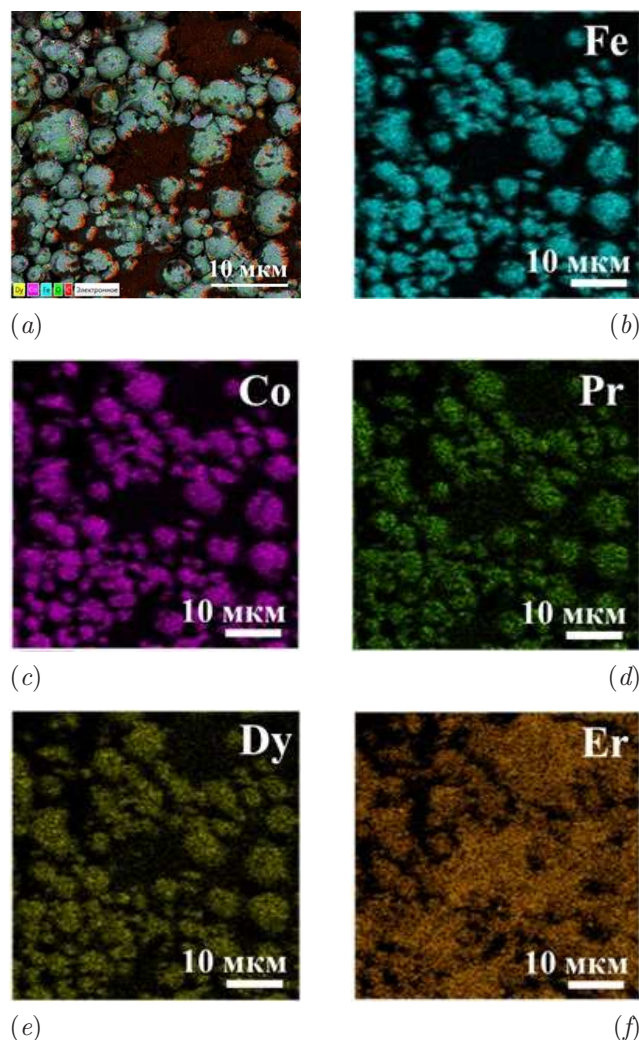


Рис. 4. СЭМ-изображение композитного материала на основе комплекса Er^{3+} и микрочастиц PrDyFeCoB с многослойным наложением элементного картирования (a); распределение химических элементов Fe, Co, Pr, Dy, Er на поверхности композитного материала (b–f)

Химические элементы, входящие в состав МЧ, были локализованы в областях, заполненных только МЧ (рис. 4 b–e), тогда как Er был распространен и в пространстве между МЧ (рис. 4 e). Атомный состав композитного образца, определенный по спектру EDX (рис. 5), был близок к ожидаемому составу, рассчитанному по исходным объемным долям: Fe (46.7 ат.%), Co (9.4 ат.%), Pr (8.8 ат.%), Dy (8.7 ат.%), Er (12.3 ат.%).

Мы анализировали три типа прессованных образцов: 1) образец 1 представляет собой чистый порошковый комплекс Er [15], спрессованный в наших экспериментах (рис. 2); 2) образец 2, который представляет собой спрессованную смесь комплекса Er с МЧ; 3) образец 3 — спрессованные МЧ, не содержащие комплексов Er.

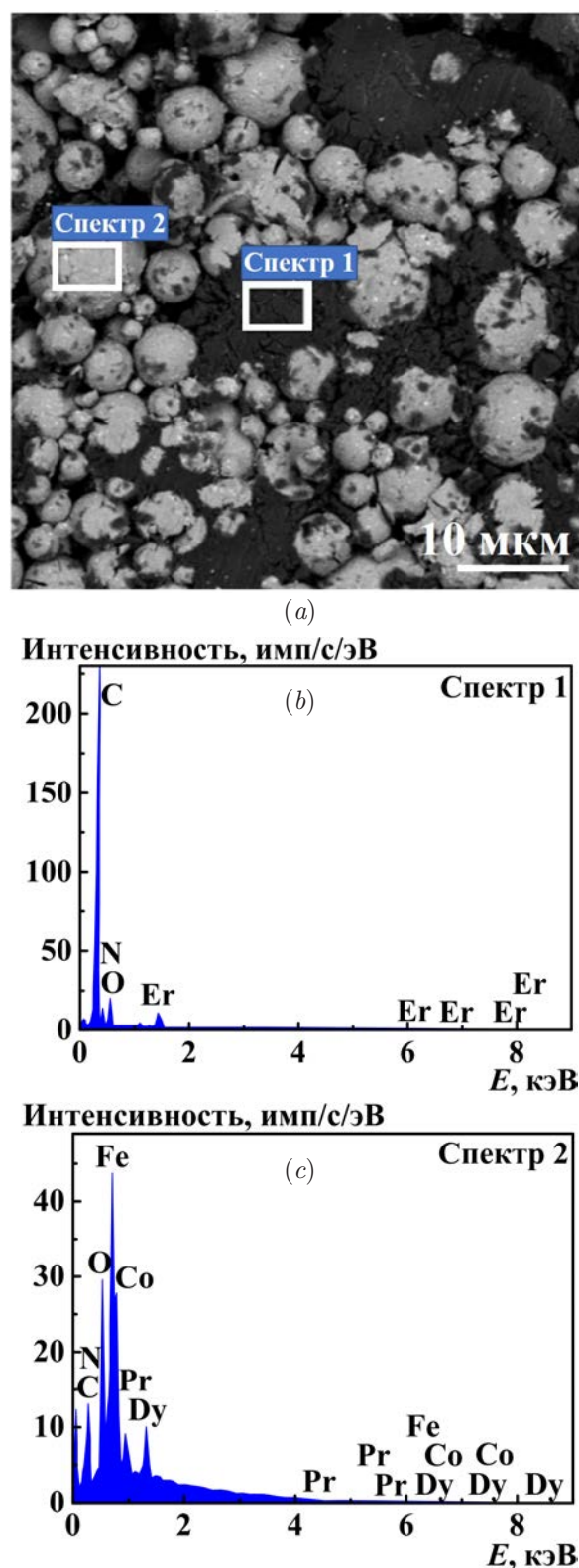


Рис. 5. a) СЭМ-изображение участка композитного материала на основе комплекса Er и микрочастиц PrDyFeCoB с указанием области проведения анализа EDX, b) элементный состав, определенный в области «Спектр 1» на рис. a, c) элементный состав, определенный в области «Спектр 2» на рис. a

Магнитные измерения проводились с помощью СКВИД-магнитометра (MPMS XL, Quantum Design). Измерения магнитной восприимчивости в переменном магнитном поле (АС) проводились при амплитуде переменного поля 4 Э в диапазоне температур 1.8–5 К на частотах 0.1–1400 Гц. Регистрировались действительная χ' и мнимая χ'' составляющие магнитной восприимчивости χ .

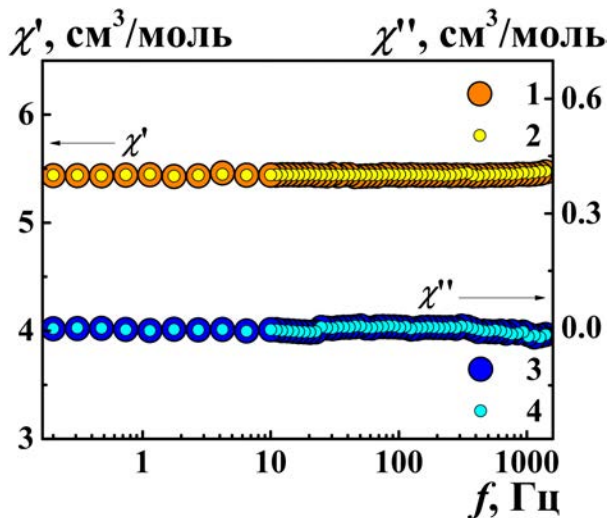


Рис. 6. Частотные зависимости действительной χ' (1, 2) и мнимой χ'' (3, 4) частей магнитной восприимчивости, зарегистрированных при температуре 2 К в нулевом магнитном поле в образце 1 (чистый комплекс Er^{3+} без МЧ). Оранжевые (1) и синие (3) символы соответствуют комплексам без предварительного намагничивания, желтые (2) и голубые (4) символы соответствуют комплексам, подвергнутым предварительному воздействию в магнитном поле 1 Тл

Сначала мы убедились, что в отсутствие магнитного поля в образце 1 (без ферромагнитных микрочастиц) отсутствуют пики на частотных зависимостях действительной χ' и мнимой χ'' частей магнитной восприимчивости (рис. 6).

Перед прессованием композита нами были аттестованы магнитные свойства образца 3 (т. е. одних только ферромагнитных частиц, спрессованных без добавления комплекса эрбия (рис. 7d)). В диапазоне температур 2–5 К, в котором мы исследовали свойства композитного материала, коэрцитивная сила фиксированных МЧ составляла $H_C = 21.6$ кЭ, а при комнатной температуре $H_C = 0.60$ кЭ. Остаточный магнитный момент составлял $M_{rem} = 0.6$ мкВ на формульную единицу, в то время как намагниченность насыщения составляла $M_{sat} = 1.13$ мкВ на формульную единицу в поле 50 кЭ (рис. 7).

Температура блокировки МЧ, определённая в точке пересечения температурных зависимостей

магнитного момента при охлаждении в поле (FC) и при охлаждении в нулевом поле (ZFC), превышает 350 К (рис. 7b). Было проверено, что ниже температуры блокирования намагниченности МЧ не вносят вклада в частотные зависимости восприимчивости от переменного магнитного поля при 2–5 К. Магнитные параметры МЧ далее использовались для оценки остаточного магнитного поля в намагниченном композите. Свойства массивов МЧ $\text{Pr}_{16}\text{Dy}_{17}\text{Fe}_{42}\text{Co}_{24}\text{B}_1$ описаны в работе [18]. Таким образом, все описанные далее максимумы магнитной восприимчивости принадлежат только комплексу Er^{3+} . В дальнейших экспериментах один и тот же протокол измерений был реализован для всех трех образцов. Магнитная восприимчивость в переменном поле (АС) использовалась для зондирования релаксационных процессов в комплексах по наличию сигналов действительной $\chi'(f)$ и мнимой $\chi''(f)$ частей магнитной восприимчивости.

Рельеф поверхности и распределение градиента магнитной силы вдоль поверхности прессованного образца были получены с помощью атомно-силового (режим АСМ) и магнитно-силового (режим МСМ) микроскопа «Интегра-Аура» (НТ-МДТ) при температуре 290 К (рис. 8). Двухпроходный алгоритм сканирования МСМ обеспечивает минимизацию влияния топографии на сканируемую магнитную карту поверхности. Для сканирования поверхности использовался кантилевер MFM LM на кремниевой основе, покрытый тонкой пленкой CoCr с коэрцитивной силой $H_C = 400$ Э, что не превышает коэрцитивную силу МЧ, $H_C = 600$ Э, при высоких температурах. Расстояние между кантилевером и частицей было близко к амплитуде колебаний кантилевера. Затем кантилевер располагался на расстоянии 50 нм от образца. Фаза колебаний кантилевера φ была прямо пропорциональна градиенту силы магнитного диполя между частицей и кантилевером. Отличие рельефа поверхности (рис. 8a) от магнитного рельефа (рис. 8b) говорит о правильной настройке сканирования, при которой можно независимо исследовать магнитные моменты микрочастиц в композите.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Сначала приведем данные о магнитной восприимчивости чистого комплекса в отсутствие ферромагнитных микрочастиц, т. е. для образца 1, помещенного во внешнее магнитное поле. В чистом комплексе Er^{3+} (образец 1), как уже было отмечено, не наблюдается медленной магнитной релаксации

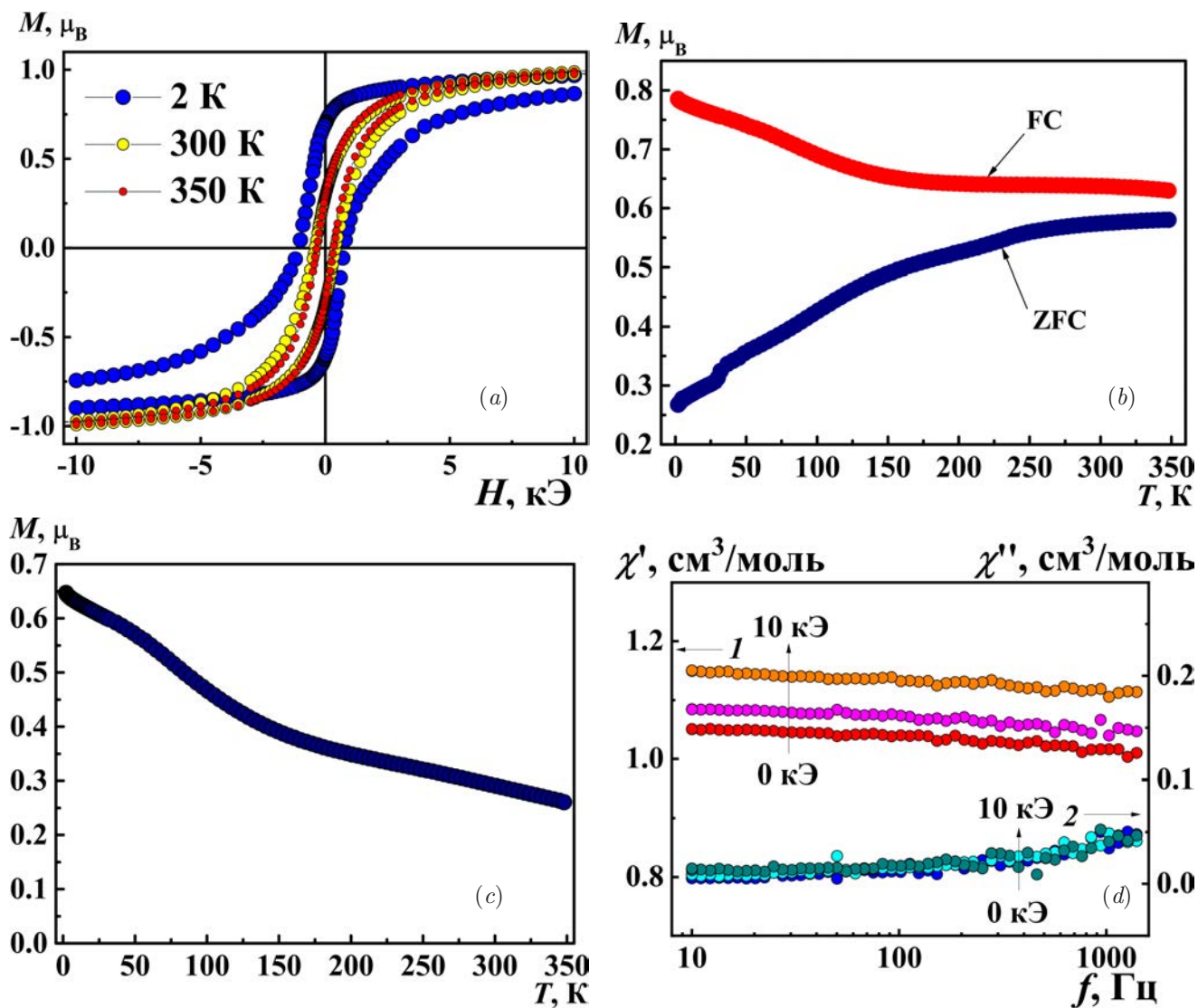


Рис. 7. *a*) Петли гистерезиса микрочастиц $\text{Pr}_{16}\text{Dy}_{15}\text{Fe}_{42}\text{Co}_{24}\text{B}_1$ (образец 3) при температурах 2, 300 и 350 К, *b*) температурные зависимости магнитного момента одиночной микрочастицы среднего диаметра 10 мкм, записанные в режимах ZFC и FC, *c*) температурная зависимость остаточного магнитного момента одной формульной единицы ферромагнитной частицы, выраженного в магнетонах Бора (образец был намагничен перед записью температурной зависимости в поле 50 кЭ при 2 К), *d*) частотная зависимость действительной (1) и мнимой (2) частей магнитной восприимчивости МЧ в магнитных полях 0, 1 и 10 кЭ при температуре 2 К

в нулевом магнитном поле при температурах 2–5 К в диапазоне частот 0.1–1400 Гц (рис. 6). Кроме того, не наблюдалось никаких пиков на зависимостях $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$ для одних только МЧ без комплексов Er^{3+} в образце 3 (рис. 7*d*). Исходные компоненты композита не проявляют медленной релаксации намагниченности при температуре 2–5 К. Этот факт был подтвержден и многочисленными предыдущими измерениями для комплексов Er^{3+} с различной симметрией полей лигандов [19–26].

В постоянном магнитном поле 300–2000 Э образец 1 демонстрировал наличие частотно-зависимого сигнала действительной и мнимой частей магнитной восприимчивости (рис. 9*a*, *b*). В работе [15] появление этого сигнала объяснялось подавлением туннельной магнитной релаксации в магнитном поле и уменьшением частоты спиновой релаксации до таких значений, которые доступны для регистрации в частотном окне СКВИД-магнитометра 0.1–1400 Гц. Поскольку главным параметром, характеризующим спиновую релаксацию, является частота спиновой

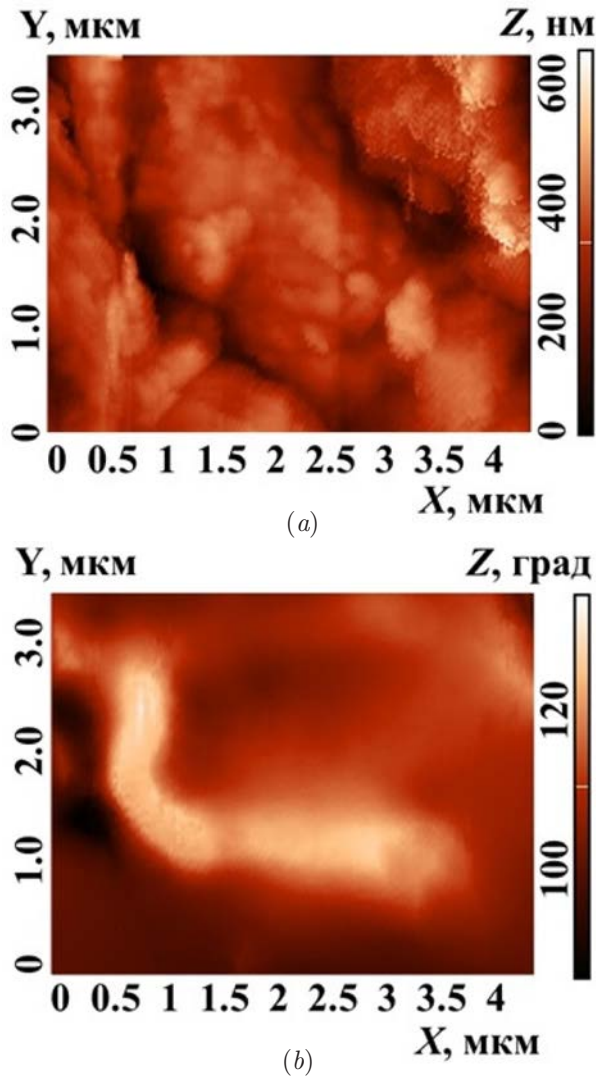


Рис. 8. АСМ-изображение (а) и соответствующее ему МСМ изображение (b) композитного материала на основе комплекса Ег и микрочастиц PrDyFeCoB

релаксации f_c , мы строили зависимости мнимой части магнитной восприимчивости от ее действительной части и извлекали f_c в результате аппроксимации формулами

$$\chi'(f) = \chi_S + \frac{(\chi_T - \chi_S) \left(1 + (2\pi f/f_c)^{1-\alpha} \sin(\pi\alpha/2) \right)}{1 + 2(2\pi f/f_c)^{1-\alpha} \sin(\pi\alpha/2) + (2\pi f/f_c)^{2(1-\alpha)}}, \quad (1)$$

$$\chi''(f) = \frac{(\chi_T - \chi_S) (2\pi f/f_c)^{1-\alpha} \cos(\pi\alpha/2)}{1 + 2(2\pi f/f_c)^{1-\alpha} \sin(\pi\alpha/2) + (2\pi f/f_c)^{2(1-\alpha)}}. \quad (2)$$

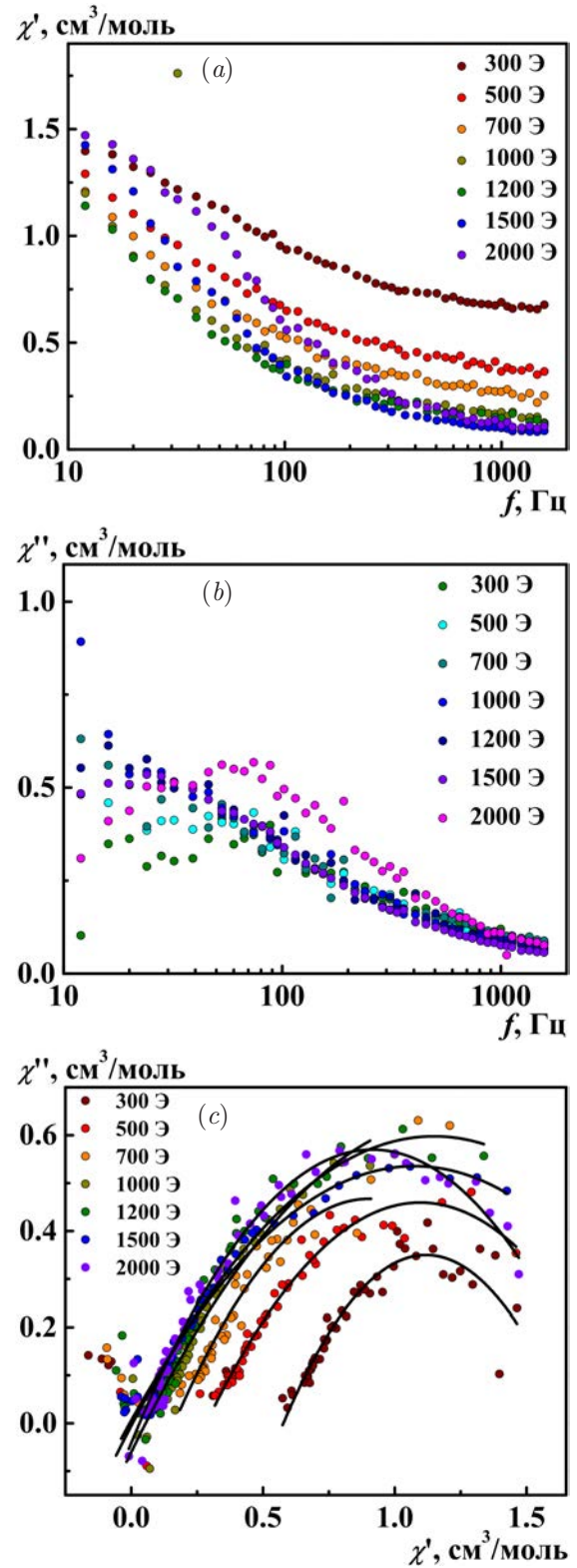


Рис. 9. Частотные зависимости действительной χ' (а) и мнимой χ'' (b) частей магнитной восприимчивости в образце 1 при температуре 2 К в постоянных полях 300–2000 Э; графики Коула–Коула $\chi'(\chi'')$ образца 1 при $T = 2$ К и внешнем поле 300–2000 Э (с); сплошные линии — аппроксимации уравнениями Коула–Коула

Параметр α характеризует ширину распределения f_c , обусловленную неоднородностью внутреннего магнитного поля в композите. Значения χ_S , χ_T представляют собой соответственно адиабатическую и изотермическую восприимчивости [22, 25]. Диаграммы Коула–Коула $\chi'(\chi'')$ анализировались после исключения частоты из выражений (1) и (2) при различных температурах и внешних полях (рис. 9с).

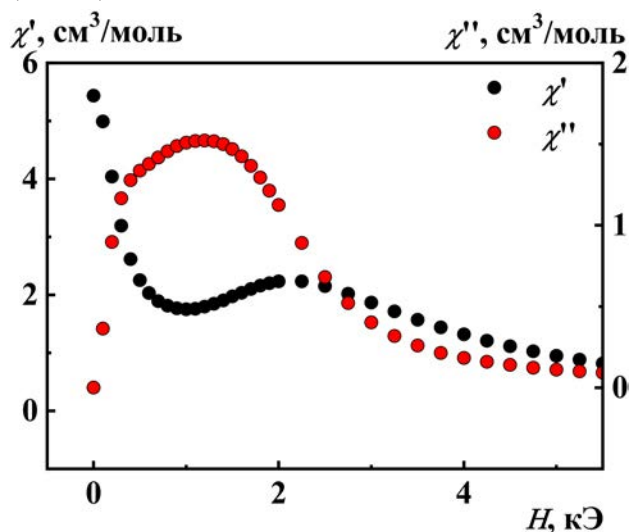


Рис. 10. Зависимость действительной и мнимой частей магнитной восприимчивости образца 1 от величины подмагничивающего поля DC при температуре 2 К. Амплитуда поля AC $h_{AC} = 4$ Э, частота $f_{AC} = 100$ Гц

В образце 2 (комплекс с микрочастицами) перед измерениями зависимостей магнитной восприимчивости от частоты нужно было сначала оптимизировать внешнее поле, при котором проводятся измерения. Для этого на образце 1 были проведены измерения зависимостей $\chi'(H)$ и $\chi''(H)$ при постоянной частоте 100 Гц (рис. 10). Эти измерения позволили установить, что максимум мнимой части обнаруживается в магнитном поле около 1.5 кЭ при температуре 2 К.

Оптимальное поле 1.5 кЭ было использовано для дальнейших измерений композита (образца 2) в магнитном поле. На рис. 11 приведены графики Коула–Коула $\chi'(\chi'')$ образца 2 при $T = 2-4$ К во внешнем поле $H = 1500$ Э (рис. 11а) и зависимость $\chi'(\chi'')$ в нулевом внешнем поле $H = 0$ после предварительного намагничивания образца 2 в поле $H_0 = 0-5$ Тл при $T = 2$ К (рис. 11б). Видно, что, в отличие от образца 1, сигнал магнитной релаксации присутствует как во внешнем поле 1500 Э (рис. 11а), так и в его отсутствии при предварительном намагничивании микрочастиц в композите (рис. 11б). Это говорит о том, что намагниченные микрочастицы влия-

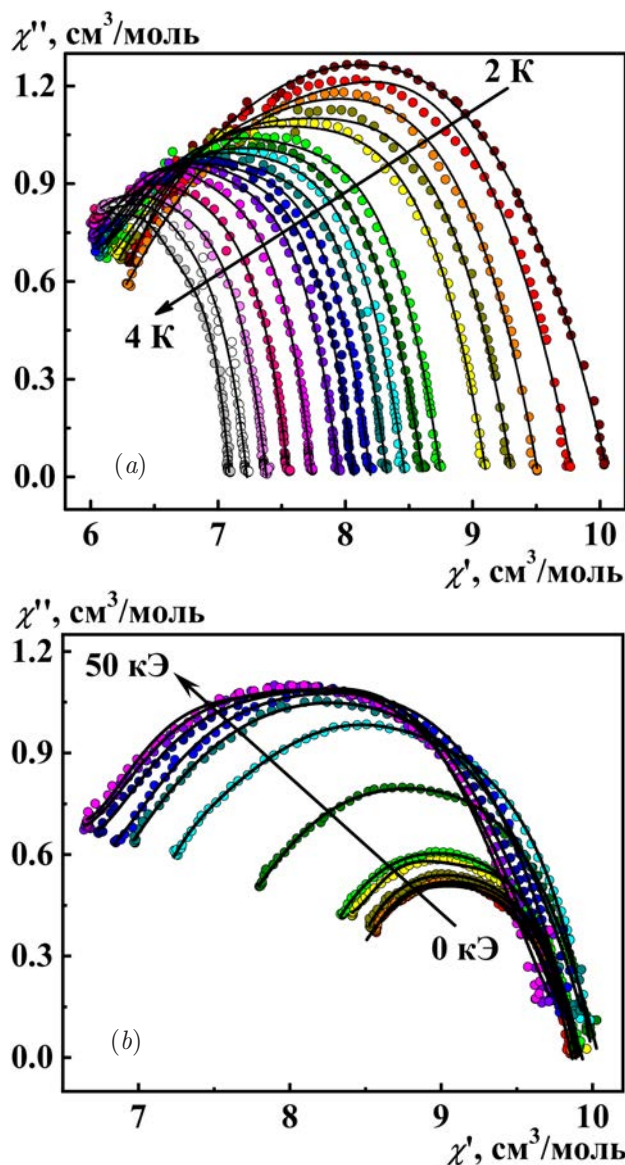


Рис. 11. а) Графики Коула–Коула $\chi'(\chi'')$ образца 2 при $T = 2-4$ К при внешнем поле $H = 1500$ Э, б) зависимость $\chi'(\chi'')$ в нулевом внешнем поле $H = 0$ после предварительного намагничивания образца 2 в поле $H_0 = 0-50$ кЭ при $T = 2$ К. Направления роста температуры и поля предварительного намагничивания показаны стрелками. Сплошные линии представляют собой аппроксимации системой уравнений (1) и (2)

ют на расщепление спиновых уровней в ионах эрбия и сдвигают частоту магнитной релаксации в удобное для регистрации частотное окно.

На рис. 12 представлены немонотонные зависимости $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$, полученные в отсутствие внешнего поля в образце 2 при 2 К. В отличие от образца 1, в образце 2 наблюдается магнитная релаксация даже в нулевом внешнем поле $H = 0$. Поскольку наличие ферромагнитных МЧ в образце 2 является его существенным отличием от образца 1, можно заклю-

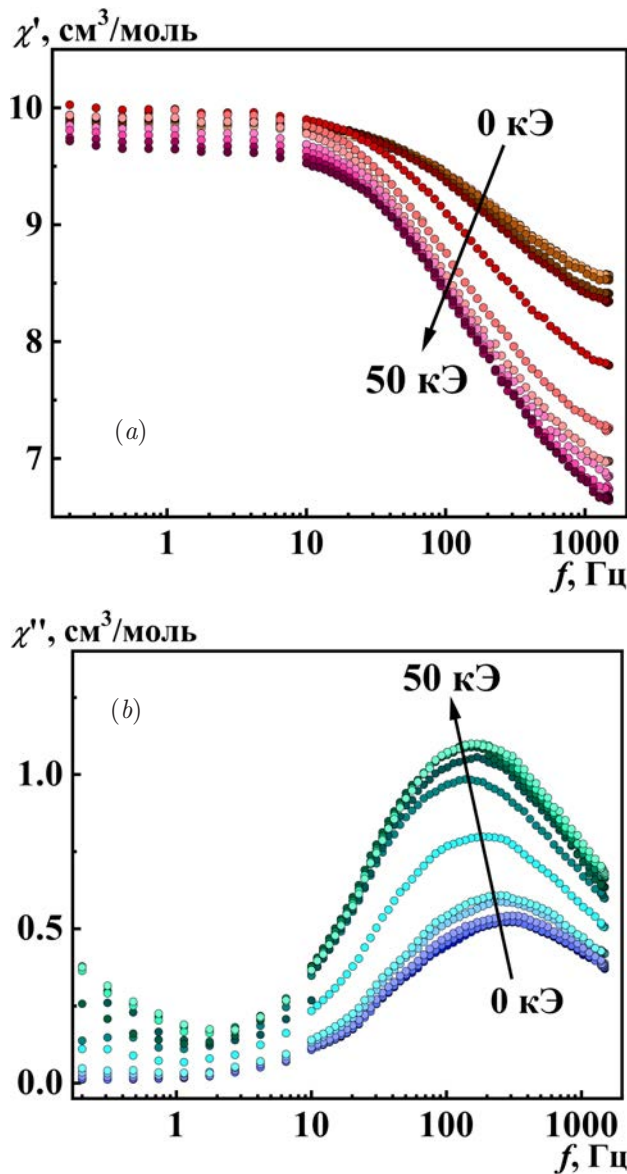


Рис. 12. Зависимости действительной χ' и мнимой χ'' частей магнитной восприимчивости в композитном образце 2, записанные в нулевом внешнем поле $H = 0$ при $T = 2$ К после их намагничивания в постоянном поле $H_0 = 0-50$ кЭ. Стрелки указывают направление увеличения поля, используемого для предварительного намагничивания образца

чить, что появление излома на зависимости $\chi'(f)$ и максимума на зависимости $\chi''(f)$ на рис. 12 обусловлены наличием ферромагнитных МЧ, намагниченных в поле, приложенном перед экспериментами.

Если из представленных выше измерений извлечь методом Коула – Коула частоту магнитной релаксации f_c при разных температурах, для образцов 1 и 2 получатся температурные зависимости $f_c(T^{-1})$ и $f_c(T^1)$ в поле 1.5 кЭ (рис. 13).

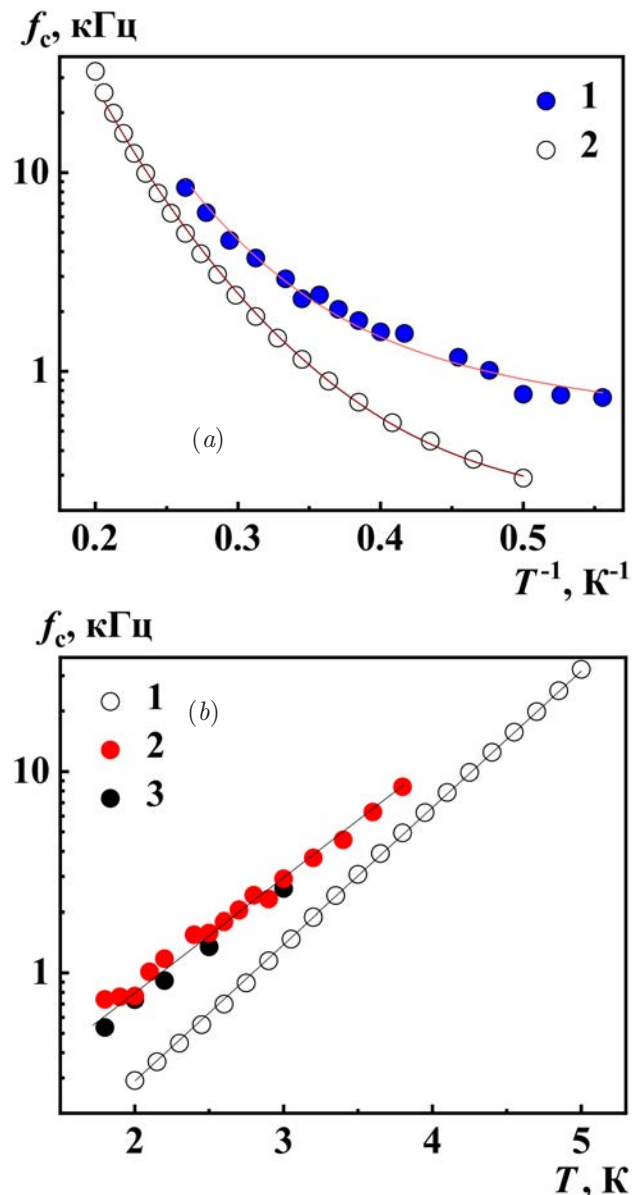


Рис. 13. Зависимость частоты релаксации f_c от обратной температуры T^{-1} , полученная в магнитном поле $H = 1500$ Э в образце 1 (1) и образце 2 (2) при объемных концентрациях комплексов эрбия 15% (2) и 20% (3) в координатах $f_c(T^{-1})$ (a) и в координатах $f_c(T)$ (b). Сплошные линии на рис. a — аппроксимации уравнением (3)

Кривая 1 для образца 1 повторяет зависимость, полученную в [15]. Видно, что в образце 2 частота релаксации в поле 1.5 кЭ больше на порядок величины при температуре 2 К (кривая 2 на рис. 13). Таким образом, в присутствии внешнего поля частота магнитной релаксации эрбия в композите увеличивается по сравнению с чистым образцом эрбия. На рис. 13b показано, что зависимости $f_c(T)$ спрямляются в полулогарифмических координатах. Далее будет показано, что этот факт не соответствует ни

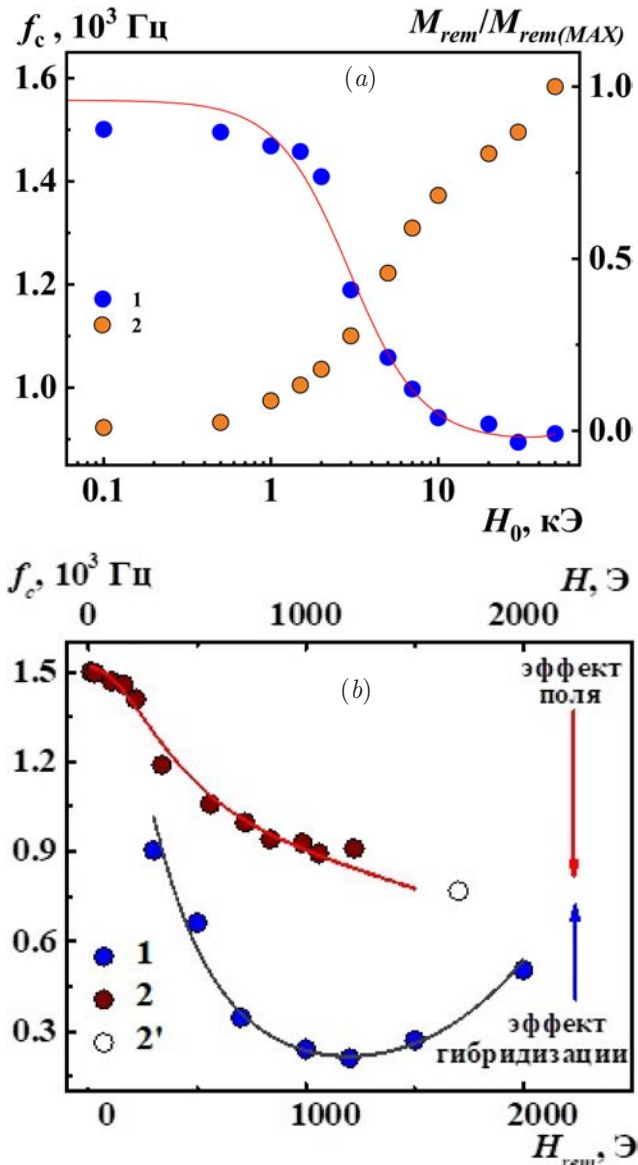


Рис. 14. а) Зависимость частоты релаксации f_c в образце 2, определенной в нулевом внешнем поле $H = 0$ после предварительного намагничивания образца в различных полях H_0 , от значения H_0 , показанного на горизонтальной оси при $T = 2$ К (1). Зависимость остаточного магнитного момента M_{rem} образца 3, нормированного на его максимальное значение $M_{rem(MAX)}$ при $T = 2$ К (2). б) Зависимость частоты релаксации f_c в образце 1 (1), измеренная во внешнем поле H при $T = 2$ К; частота релаксации в образце 2 (2), измеренная в нулевом поле от остаточного поля H_{rem} , созданного предварительным намагничиванием образца; частота релаксации в образце 2 (2'), измеренная во внешнем поле 1500 Э и с представленной поправкой 200 Э, вызванной внутренним полем в композите. Сплошные линии — аппроксимации уравнением (4)

одному из известных механизмов магнитной релаксации ни в чистых комплексах, ни в их композициях с ферромагнитными микрочастицами. Возмож-

но, это указывает на существование неизвестного до сих пор механизма магнитной релаксации, которая подчиняется в комплексах Er^{3+} эмпирической зависимости $f_c \sim \alpha + \beta \exp(\gamma T)$, где α , β и γ — параметры, не зависящие от температуры.

Поскольку некоторые каналы релаксации могут быть подавлены внешним магнитным полем, мы исследовали зависимость частоты релаксации, извлекаемой методом Коула–Коула от магнитного поля [27]. На рис. 14а показана зависимость f_c от поля H_0 , используемого для предварительного намагничивания МЧ в нем, в условиях, когда магнитная восприимчивость измеряется в нулевом внешнем поле при температуре 2 К (кривая 1). Для сравнения показана зависимость нормированной остаточной намагниченности образца $3M_{rem}/M_{rem(MAX)}$ от предварительно приложенного поля. Эта зависимость также была получена в нулевом внешнем поле в независимом измерении. Видно, что кривые $f_c(H_0)$ и $M_{rem}/M_{rem(MAX)}(H_0)$ обладают сходством, что говорит о том, что зеемановское взаимодействие ионов эрбия в комплексах с намагниченными МЧ влияет на частоту релаксации. На рис. 14б показана зависимость частоты релаксации f_c от остаточного магнитного поля H_{rem} , рассчитанного из измеренной намагниченности M_{rem} по формуле Киттеля для однородно намагниченного шара $H_{rem} = 2/3\pi M_{rem}$. При этом мы исходили из данных [9], где на примере композита с ионами Co^{2+} было установлено, что при используемой концентрации комплексов и тех же микрочастицах внутреннее остаточное поле близко к полю на поверхности одной микрочастицы.

Таким образом, хотя оценка внутреннего поля, создаваемого ансамблем хаотически распределенных микрочастиц затруднительна, мы воспользовались результатом предыдущей работы [9], где эквивалентное внутреннее поле H_{rem} измерялось путем определения положения пика на кривой $\chi''(f)$ в композите комплекса Со с той же концентрацией МЧ, что и в композите комплекса эрбия и МЧ в данной работе.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Хотя на рис. 13б зависимости $f_c(T)$ спрямляются в полулогарифмических координатах, мы аппроксимировали данные на рис. 13а общепринятым выражением, учитывающим несколько конкурирующих вкладов, определяющих скорость спиновой релаксации [3, 4, 19, 28, 29]:

Таблица 1. Параметры аппроксимации зависимостей $f(T^{-1})$ уравнением (3) в образцах 1 и 2

	f_{QTM} , Гц	A , $\text{Э}^{-4}\text{с}^{-1}\text{К}^{-1}$	C , $\text{с}^{-1}\text{К}^{-n}$	n	f_0 , с	U_{eff} , К
Образец 1	200	$4.74 \cdot 10^{-13}$	1.40	6.14	$4.0 \cdot 10^{-12}$	87
Образец 2	98	$6.83 \cdot 10^{-11}$	1.47	6.42	$4.0 \cdot 10^{-12}$	87

Таблица 2. Параметры аппроксимации зависимостей $f_c(H_{rem})$ уравнением (4) в образцах 1 и 2

	A_1 , $\text{с}^{-1}\text{К}^{-1}\text{Э}^{-4}$	B_1 , с^{-1}	B_2 , Э^{-2}	Z , с^{-1}
Образец 1	$1.431 \cdot 10^{-11}$	1815	$9.43 \cdot 10^{-6}$	34
Образец 2	$1.098 \cdot 10^{-12}$	644	$5.45 \cdot 10^{-6}$	872

$$f_c = f_{QTM}(H) + AH^4T + CT^n + f_0 \exp\left(\frac{-U_{eff}}{kT}\right), \quad (3)$$

где U_{eff} — эффективный энергетический барьер, возникающий из-за одноионной магнитной анизотропии и разделяющий состояния иона с противоположными направлениями спина, k — постоянная Больцмана. Член $f_{QTM}(H)$ в уравнении (3) зависит от поля, но не зависит от температуры, поскольку он связан с квантовым туннелированием намагниченности (QTM). Слагаемое $A(H)T$ описывает прямую релаксацию, зависящую от поля, тогда как слагаемое CT^n соответствует независимому от поля рамановскому процессу с $n = 6$ для ионов Крамерса, каким является Er^{3+} . Экспоненциальный член $f_0 \exp(-U_{eff}/kT)$ описывает частоту независимой от поля спин-решеточной релаксации Орбаха. Извлеченные параметры аппроксимации зависимости $f_c(T^{-1})$ приведены в табл. 1

Изменение под действием микрочастиц в основном претерпевают два параметра, f_{QTM} и A , относящиеся соответственно к квантовому туннелированию и прямой магнитной релаксации. При добавлении МЧ параметр f_{QTM} уменьшается примерно в 2 раза, а параметр A увеличивается примерно в 100 раз. Остальные параметры, C , n , f_0 , U_{eff} , остаются постоянными и близки к значениям, выявленным в [15] для образца 1. При высоких температурах, более 4 К, различие между значениями f_c на кривых 1 и 2 рис. 13а исчезает, поскольку доминирующими становятся магнитные релаксации Рамана и Орбаха, не зависящие от поля.

Далее мы анализировали зависимость расчетной частоты релаксации f_c от внешнего поля и от эффективного магнитного поля в композите, которое складывается из внешнего поля и магнитного поля, создаваемого предварительно намагниченными

микрочастицами. Поле, создаваемое такими микрочастицами, варьировалось в диапазоне 0–1.2 кЭ. На рис. 14b видно, что в образце 1 (черная кривая 1) во внешнем поле частота релаксации меньше по сравнению с композитным образцом 2 (красная кривая 2) в том же внутреннем остаточном поле. Это можно объяснить двумя способами: либо неверно рассчитано остаточное поле в композите, либо имеется дополнительный канал влияния контакта МЧ с комплексами, кроме их зеемановского взаимодействия.

На рис. 14b одиночный символ (2') соответствует частоте релаксации, определенной в образце 2 во внешнем магнитном поле, скорректированном с расчетным внутренним полем в образце 2, т. е. к внешнему полю мы добавили поле однородно намагниченного шара $H_{rem} = 2/3\pi M_{rem} = 200$ Э. Этот эксперимент с образцом 2 в поле хорошо соответствует полевой зависимости, записанной в нулевом поле (красные символы). Это показывает, что оценка внутреннего остаточного поля верна. Немонотонная зависимость $f_c(H)$ в эталонном образце 1 указывает на конкуренцию двух различных процессов противоположного знака, влияющих на частоту релаксации. Один процесс уменьшает частоту релаксации, а другой ее увеличивает (рис. 10). Процесс уменьшения f_c (положительный эффект) зависит от поля, тогда как процесс увеличения f_c (отрицательный эффект) является просто результатом покрытия комплекса Er^{3+} металлической матрицей.

Разумно предположить, что положительный эффект оказывает влияние внутреннего магнитного поля ферромагнитной матрицы на прямую и туннельную релаксацию, а отрицательный вклад, не зависящий от поля и целиком сдвигающий всю кривую вверх по оси частот, соответствует химической модификации комплексов за счет их контакта с ме-

таллическими МЧ. Модификация химических связей в комплексах SMM и SIM, нанесенных на металлическую поверхность, хорошо известна и описана в литературе [12, 13, 30]. Гибридизация орбитального момента комплексов, нанесенных на металлическую поверхность, является доминирующим движущим фактором, удобным для объяснения увеличения частоты релаксации (отрицательный эффект). Положительный эффект можно объяснить аналогично наблюдаемому в [8], где рассеивающее поле сверхпроводника влияло на спиновую динамику в молекулярных магнетиках, нанесенных на металлическую поверхность. В работе [8] под действием поля рассеяния сверхпроводника инициирован переход SMM из спинового состояния, заблокированного барьером анизотропии, в состояние, в котором происходит релаксация с помощью QTM. В наших экспериментах этот механизм обеспечивает зависимость частоты релаксации от поля.

Зависимости частоты релаксации от внешнего магнитного поля для квантового туннелирования и прямой релаксации хорошо известны для одноионных магнетиков Er^{3+} [19, 20, 31]. Для аппроксимации зависимости $f_c(H_{rem})$ (рис. 14b) использовалось следующее выражение:

$$f_c = \frac{B_1}{1 + B_2 H_{rem}^2} + A_1 H_{rem}^4 T + Z. \quad (4)$$

Первый член в уравнении (4) соответствует полевой зависимости частоты квантовой туннельной релаксации; второй член соответствует прямой релаксации, зависящей от поля, а третий член Z соответствует вкладам гибридизации и магнитных релаксаций Рамана и Орбаха, не зависящих от магнитного поля. Параметры, извлеченные из аппроксимации зависимости $f_c(H_{rem})$, представлены в табл. 2.

Коэффициент, соответствующий прямой релаксации A_1 , лежит в диапазоне, характерном для других соединений Er^{3+} [20, 21, 32]. Значения параметров B_1 и B_2 также близки к опубликованным для ионов Er^{3+} в указанной литературе. Сравнение этих параметров в образце 1 и образце 2 в табл. 2 показывает, что наиболее сильное различие проявилось в параметре Z , который соответствует не зависящим от поля магнитным релаксациям Рамана и Орбаха и эффекту гибридизации. Этот факт подтверждает гипотезу о том, что отрицательный эффект (нисходящая часть кривой 1 на рис. 14b) обусловлен процессами, не зависящими от магнитного поля.

5. ВЫВОДЫ

1. Магнитная релаксация в комплексах $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})](\text{solv})$ изменяется после их внедрения в ферромагнитные среды. Мы обнаружили две причины влияния матрицы PrDyFeCoB на магнитную релаксацию: (i) орбитальная гибридизация, вызванная химическим связыванием соединения с поверхностью металла, увеличивает частоту релаксации; (ii) магнитодипольное взаимодействие, обеспечиваемое остаточной намагниченностью матрицы, уменьшает частоту релаксации.

2. Комплексы $[\text{Er}(\text{HL})(\text{L})](\text{solv})$ с быстрой релаксацией в нулевом поле неудобны для квантовых операций. Введение комплексов в ферромагнитную среду приводит к частоте релаксации, доступной для обнаружения СКВИД-магнитометром даже в нулевом внешнем поле. Внутреннее магнитное поле подавляет прямую релаксацию и квантовую туннельную релаксацию, в то время как релаксации Рамана и Орбаха остаются неизменными.

3. Внутреннее остаточное магнитное поле массива микрочастиц PrDyFeCoB зависит от намагниченности микрочастиц. Это поле можно изменять в диапазоне 0–1.2 кЭ, ограниченном магнитным насыщением ферромагнитных зерен в микрочастицах. Этого диапазона достаточно, чтобы поддерживать медленную магнитную релаксацию в комплексах, помещенных между микрочастицами. Магнитной релаксацией можно управлять с помощью предварительно приложенного внешнего магнитного поля, обеспечивающего остаточное поле желаемой величины.

4. Предложен простой способ уменьшения частоты магнитной релаксации в тех соединениях, где экспериментальное наблюдение магнитной релаксации невозможно в нулевом внешнем поле. Облегчение измерения релаксации может включать множество новых соединений в круг потенциально удобных квантовых кубитов.

Финансирование. Работа выполнена в рамках тематической карты Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук АААА-А19-119092390079-8. Работа Д. Е. В. поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 20-33-90256).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Mannini, F. Pineider, P. Saintavitt et al., Nat. Mater. **8**, 194 (2009).

2. R. Mitsuhashi, K.S. Pedersen, T. Ueda et al., *Chem. Commun.* **54**, 8869 (2018).
3. M. Brzozowska, G. Handzlik, M. Zychowicz et al., *Magnetochemistry* **7**, 125 (2021).
4. A. Zabala-Lekuona, J.M. Seco, and E. Colacio, *Coord. Chem. Rev.* **441**, 213984 (2021).
5. M.N. Leuenberger and D. Loss, *Nature* **410**, 789 (2001).
6. M.R. Wasielewski, M.D.E. Forbes, N.L. Frank et al., *Nat. Rev. Chem.* **4**, 490 (2020).
7. A. Gaita-Ariño, F. Luis, S. Hill et al., *Nat. Chem.* **11**, 301 (2019).
8. G. Serrano, L. Poggini, M. Briganti et al., *Nat. Mater.* **19**, 546 (2020).
9. E. Dvoretzkaya, A. Palii, O. Koplak et al., *J. Phys. Chem. Solids* **157**, 110210 (2021).
10. J.D. Rinehart and J.R. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 12558 (2009).
11. M. Ren, S.S. Bao, R.A.S. Ferreira et al., *Chem. Commun.* **50**, 7621 (2014).
12. G. Albani, A. Calloni, M.S. Jagadeesh et al., *J. Appl. Phys.* **128**, 035501 (2020).
13. A. Lodi Rizzini, C. Krull, T. Balashov et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 177205 (2011).
14. K. Kumar, O. Stefanczyk, S. Chorazy et al., *Inorg. Chem.* **58**, 5677 (2019).
15. T.A. Bazhenova, I.A. Yakushev, K.A. Lyssenko et al., *Magnetochemistry* **6**, 60 (2020).
16. J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, P. Martin-Ramos et al., *Mater. Chem. Phys.* **160**, 429 (2015).
17. H.Q. Ye, Z. Li, Y. Peng et al., *Nat. Mater.* **13**, 382 (2014).
18. R. Morgunov, A. Talantsev, E. Kunitsyna et al., *IEEE Trans. Magn.* **52**, 1 (2016).
19. E. Lucaccini, L. Sorace, M. Perfetti et al., *Chem. Commun.* **50**, 1648 (2014).
20. R. Jankowski, J.J. Zakrzewski, O. Surma et al., *Inorg. Chem. Front.* **6**, 2423 (2019).
21. L. Münzfeld, C. Schöo, S. Bestgen et al., *Nat. Commun.* **10**, 1 (2019).
22. D.C. Izuogu, T. Yoshida, G. Cosquer et al., *Chemistry A European J.* **26**, 6036 (2020).
23. I.A. Kühne, L. Ungur, K. Esien et al., *Dalt. Trans.* **48**, 15679 (2019).
24. P. Shukla, S. Roy, D. Dolui et al., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, 823 (2020).
25. J. Mayans, Q. Saez, M. Font-Bardia et al., *Dalt. Trans.* **48**, 641 (2019).
26. Q. Zou, X. Da Huang, J.C. Liu et al., *Dalt. Trans.* **48**, 2735 (2019).
27. K.S. Cole and R.H. Cole, *J. Chem. Phys.* **9**, 341 (1941).
28. K.N. Shrivastava, *Phys. Status Solidi* **117**, 437 (1983).
29. Y.S. Ding, K.X. Yu, D. Reta et al., *Nat. Commun.* **9**, 1 (2018).
30. K. Diller, A. Singha, M. Pivetta et al., *RSC Adv.* **9**, 34421 (2019).
31. G. Handzlik, M. Magott, M. Arczynski et al., *Dalt. Trans.* **49**, 11942 (2020).
32. H. Ogasawara, A. Kotani, R. Potze et al., *Phys. Rev. B* **44**, 5465 (1991).

К ЗАДАЧЕ О СВЯЗАННОМ СОСТОЯНИИ ЭЛЕКТРОНА И ДЫРКИ В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

П. А. Крачков^{а*}, И. С. Терехов^{а**}

^а Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 23 мая 2022 г.,
после переработки 9 сентября 2022 г.
Принята к публикации 10 сентября 2022 г.

Рассмотрены взаимодействующие электрон и дырка в дихалькогенидах переходных металлов. Для исследования взаимодействия было получено уравнение Бете–Солпитера в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия. Показано, что поведение потенциала на малых расстояниях существенно влияет на значения энергий связи электрона и дырки. Получено, что разложение уравнения Бете–Солпитера при малой константе связи не содержит сингулярных операторов. Поэтому энергия связи электрона и дырки не содержит параметра регуляризации. Используя теорию возмущений по константе связи, мы аналитически рассчитали энергии основного и первого возбужденного состояний. Для произвольных значений константы связи численно получены энергии связанных состояний электрона и дырки. Также численно найдены критические значения константы связи для кулоновского потенциала и для экспоненциально убывающего потенциала.

DOI: 10.31857/S0044451023020098
EDN: OQSTQJ

1. ВВЕДЕНИЕ

В 2004 г. появилась знаменитая статья [1], посвященная экспериментальному исследованию графена. Статья вызвала всплеск интереса к двумерным и квазидвумерным материалам. Одними из таких материалов являются двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ). Эти материалы представляют собой полупроводники, имеющие ширину запрещенной зоны порядка 2 эВ, см., например, [2]. Кроме того, ДПМ — это дираковские материалы, т. е. движение одночастичных возбуждений электронного газа в них описывается двумерным уравнением Дирака. Исследование энергий экситонных состояний (связанных состояний электрона и дырки) для ДПМ является интересной задачей как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Сравнение теоретических предсказаний экситонного спектра со спектром, полученным экспериментально, может дать понимание природы электрон-электронного взаимодействия в ДПМ.

Теоретическое исследование взаимодействующих электрона и дырки в материалах представляет собой довольно сложную задачу. Эта сложность связана с нетривиальностью введения взаимодействия в модель. Было много попыток описать взаимодействие электрона и дырки в двумерных ДПМ, см., например, [3–10]. Так, в работе [5] для нахождения гамильтониана, описывающего взаимодействующие электрон и дырку, авторы преобразовали гамильтониан невзаимодействующих электрона и дырки к блочно-диагональному виду. Затем полученный гамильтониан разложили по малому параметру в предположении, что кинетическая энергия много меньше ширины запрещенной зоны. После этого в гамильтониан ввели слагаемое, отвечающее кулоновскому взаимодействию. В работе [3] для нахождения спектра экситонов и исследования критического поведения системы рассматривается двумерное модифицированное уравнение Дирака для частицы в кулоновском поле. В работах [4, 6] гамильтониан системы был выбран в виде суммы трех слагаемых. Первое второе и третье слагаемые являются кинетической энергией частицы с приведенной массой, потенциалом взаимодействия и слагаемым, связанным с кривизной Берри, соответственно. Также в рабо-

* E-mail: p.a.krachkov@inp.nsk.su

** E-mail: i.s.terekhov@inp.nsk.su

те [4] для описания системы обсуждались еще два уравнения. Первое — уравнение Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц с гамильтонианом, разложенным по малому параметру отношения энергии связи к ширине запрещенной зоны. Второе уравнение является некоторой модификацией уравнения Бете–Солпитера. В работе [9] рассматривается уравнение Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц. Авторы получили разложение этого уравнения по малой константе связи в ведущем и следующем за ведущим порядке. Результат разложения совпал с уравнением, полученным в [4]. Было обнаружено, что при разложении гамильтониана возникают неинтегрируемые сингулярные операторы. Поэтому для вычисления поправок по константе связи к энергиям экситона необходимо ввести некоторый параметр регуляризации [9]. Таким образом, поправки зависят от параметра регуляризации. Зависимость энергий связи от внешних параметров выглядит необычно, поэтому необходимо дальнейшее изучение взаимодействующих электрона и дырки. Различные подходы к задаче показывают сложность добавления в систему взаимодействия между электронами.

Эта сложность связана с тем, что задача о взаимодействии электрона и дырки в дихалькогенидах не является двухчастичной, поскольку существуют электроны под поверхностью Ферми, которые приводят к появлению электрон-дырочных возбуждений в промежуточных состояниях. Аналогичные задачи рассматривались в рамках квантовой теории поля, см., например, [11, 12]. Уравнение, описывающее связанные состояния электрона и дырки, — это уравнение Бете–Солпитера (УБС). Поэтому для нахождения экситонного спектра необходимо получить УБС для системы взаимодействующих электрона и дырки. УБС для полупроводников было получено в работе [13]. УБС для двумерных ДПМ рассматривалось в работах [8, 10]. В работе [8] авторы численно решили УБС и нашли спектр экситонов. При получении спектра учитывались как приближение случайных фаз для потенциала, так и поправки, связанные с оператором собственной энергии. Однако одночастичная функция Грина, используемая в работе [8], соответствует частице с параболической зависимостью энергии от импульса, тогда как в ДПМ одночастичные возбуждения описываются двумерным уравнением Дирака и имеют другой закон дисперсии. Приближение для функции Грина, используемое в работе [8], означает малость кинетической энергии частицы по сравнению с шириной

запрещенной зоны. Однако величины кинетической энергии и энергии взаимодействия для электронов в ДПМ имеют порядок ширины запрещенной зоны, поэтому такое приближение для функции Грина некорректно.

В настоящей работе мы получаем УБС для системы взаимодействующих электрона и дырки в двумерных ДПМ в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия. Мы исследуем решения полученного уравнения для разных значений константы связи и для разных типов потенциалов. Для кулоновского потенциала мы находим аналог нерелятивистского приближения для УБС, который можно использовать в случае малой константы связи. Найденное уравнение отличается от полученного в работах [4, 9] и не содержит неинтегрируемых операторов, поэтому поправка к энергии экситона не зависит от параметра регуляризации. Мы также находим численно критическое значение константы связи, т. е. значение константы связи, при котором энергия основного состояния экситона достигает валентной зоны. Для исследования поведения решений вблизи критических значений константы связи мы рассмотрели локализованный потенциал, не содержащий особенностей.

Статья имеет следующую структуру: в разд. 2 мы описываем модель, получаем УБС для электрона и дырки; в разд. 3 рассматриваем разложение УБС при малой константе связи и показываем, что стандартный метод разложения УБС в случае кулоновского потенциала приводит к появлению неинтегрируемых поправок к потенциалу взаимодействия. В разд. 3.1 находим правильное разложение УБС в случае кулоновского потенциала взаимодействия. В разд. 4 представлено точное численное решение для УБС. В этой же главе мы сравниваем точное решение и решение, полученное с помощью теории возмущений. Также мы находим критические значения констант связи. В Заключение обсуждаются полученные результаты.

2. МОДЕЛЬ

Стартовой точкой нашего рассмотрения является гамильтониан, описывающий спектр одночастичных возбуждений в двумерных ДПМ [14]:

$$\hat{H}_\lambda = v_0 (\tau \hat{p}_x \sigma^x + \hat{p}_y \sigma^y) + \frac{\Delta}{2} \sigma^z - \lambda \tau \frac{\sigma^z - 1}{2} s_z, \quad (1)$$

где $(\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ — матрицы Паули, отвечающие псевдоспиновой степени свободы, $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)$ — оператор импульса, s_z — матрица Паули, отвечающая

спиновой степени свободы, $\tau = \pm 1$ — индекс, отвечающий долине, λ — параметр спин-орбитального взаимодействия, Δ — ширина запрещенной зоны. В уравнении (1) мы ввели скорость $v_0 = at/\hbar$, a — постоянная решетки, t — интеграл перекрытия, $\hbar$ — постоянная Планка, см. детали в [14]. Значения параметров Δ , λ , t , и a можно найти в таблице 1 работы [14]. Поскольку $\lambda/\Delta \ll 1$, мы в качестве нулевого приближения положим $\lambda = 0$. Тогда гамильтониан (1) принимает вид

$$\hat{H} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + m\sigma^z, \quad (2)$$

где $m = \Delta/2$ — масса квазичастицы, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y)$. Здесь и далее мы переходим к безразмерным величинам и полагаем $\hbar = v_0 = 1$. Кроме того, мы без потери общности рассматриваем случай $\tau = 1$. Собственные значения E гамильтониана (2) зависят от импульса следующим образом:

$$E(p) = \pm \sqrt{p^2 + m^2}. \quad (3)$$

Отметим, что каждый уровень энергии четырехкратно вырожден, дважды по спиновой степени свободы и дважды по числу долин.

Для нахождения энергетического спектра экситонов необходимо ввести взаимодействие в гамильтониан:

$$(\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_e) + m\sigma_e^z + (\boldsymbol{\sigma}_h \cdot \hat{\mathbf{p}}_h) + m\sigma_h^z, \quad (4)$$

где индексы e и h соответствуют электрону и дырке. В работах [3–7] отправной точкой рассмотрения является разложение гамильтониана невзаимодействующих частиц вблизи энергии электрон-дырочной пары равной $2m$. Затем добавляется потенциал взаимодействия $V(r)$ и некоторые слагаемые, связанные с кривизной Берри, см., например, [4, 6]. Такое рассмотрение аналогично нерелятивистскому разложению в квантовой электродинамике. Хорошо известно, что это разложение справедливо, когда выполняется следующее соотношение: $(2m - E_{exc})/m \ll 1$, где E_{exc} — энергия пары электрон-дырка [11]. Однако для таких материалов, как WS_2 и WSe_2 , энергия связи электрона и дырки порядка m , т.е. $(2m - E_{exc})/m \sim 1$, см. [15, 16]. Это означает, что величина эффективной безразмерной константы связи между квазичастицами порядка единицы. Для такой константы связи аналог нерелятивистского разложения неприменим, поскольку электрон-дырочные возбуждения в промежуточном состоянии могут существенно изменить взаимодействие, см. [11, 12]. Поэтому применимость аналога нерелятивистского разложения для

взаимодействующих электрона и дырки в двумерных ДПМ спорно.

В рамках квантовой электродинамики показано, что УБС описывает связанные состояния электрона и позитрона [11, 12]. Теория электронного газа в полупроводниках аналогична квантовой электродинамике, поэтому для исследования свойств экситонов (связанных состояний электрона и дырки) в полупроводниках необходимо найти и решить УБС [13]. Используя технику, описанную в [12], мы получаем УБС для взаимодействующих электрона и дырки в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия:

$$\Psi^{i,j}(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1 | \varepsilon_2, \mathbf{p}_2) = -iG_e^{i,n}(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1)G_h^{j,l}(\varepsilon_2, \mathbf{p}_2) \times \int \frac{d\mathbf{q} d\omega}{(2\pi)^3} V(\mathbf{q}) \Psi^{n,l}(\varepsilon_1 + \omega, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \varepsilon_2 - \omega, \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}), \quad (5)$$

где $V(\mathbf{q})$ — это фурье-образ потенциала электрон-электронного взаимодействия $V(r)$, $G_a^{i,m}(\varepsilon, \mathbf{p})$ — функция Грина частицы, индекс $a = \{e, h\}$ соответствует электрону/дырке, а верхние индексы отвечают матричным элементам сигма-матриц. Функция Грина имеет следующий вид:

$$G_a^{i,m}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{\varepsilon + (\boldsymbol{\sigma}_a^{i,m} \cdot \mathbf{p}) + m(\sigma_a^z)^{i,m}}{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 - m^2 + i0}. \quad (6)$$

Мнимая добавка в знаменателе функции Грина означает, что энергия Ферми расположена в середине запрещенной зоны. Волновая функция Бете–Солпитера Ψ зависит от двух энергий ε_1 и ε_2 , однако волновая функция экситона должна зависеть только от одной энергии (одного времени во временном представлении). Поэтому функция Ψ не может рассматриваться в качестве волновой функции экситона. Эта проблема хорошо изучена [12]. Для получения волновой функции экситона в уравнении (5) мы переходим к новым переменным E и Ω : $\varepsilon_1 = E/2 + \Omega$, $\varepsilon_2 = E/2 - \Omega$. Затем интегрируем по переменной Ω обе части уравнения и получаем

$$\tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -i \int \frac{d\Omega}{2\pi} G_e \left(\frac{E}{2} + \Omega, \mathbf{p}_1 \right) \times \times G_h \left(\frac{E}{2} - \Omega, \mathbf{p}_2 \right) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(\mathbf{q}) \tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}), \quad (7)$$

где введена волновая функция экситона:

$$\tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \int \frac{d\Omega}{2\pi} \Psi \left(\frac{1}{2}E + \Omega, \mathbf{p}_1 | \frac{1}{2}E - \Omega, \mathbf{p}_2 \right).$$

Здесь и далее мы опускаем индексы, отвечающие элементам сигма-матриц. Ниже мы будем рассматривать экситон с нулевым полным импульсом,

т. е. $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$. Выполняя интегрирование по переменной Ω в правой части уравнения (7), мы получаем следующее уравнение для волновой функции экситона $\psi(E, \mathbf{p}) = \tilde{\psi}(E, \mathbf{p}, -\mathbf{p})$:

$$(E - (\boldsymbol{\sigma}_e - \boldsymbol{\sigma}_h) \cdot \mathbf{p} - (\sigma_h^z + \sigma_e^z) m) \psi(E, \mathbf{p}) = (\Lambda^{--}(\mathbf{p}) - \Lambda^{++}(\mathbf{p})) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) \psi(E, \mathbf{q}), \quad (8)$$

где операторы $\Lambda^{\pm\pm}$ имеют следующий вид:

$$\Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p}) = \Lambda_e^{\pm}(\mathbf{p}) \Lambda_h^{\pm}(-\mathbf{p}), \quad (9)$$

$$\Lambda_a^{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{\omega(\mathbf{p}) \pm (\boldsymbol{\sigma}_a \cdot \mathbf{p} + m\sigma_a^z)}{2\omega(\mathbf{p})}, \quad (10)$$

$$\omega(\mathbf{p}) = \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Отметим, что уравнение (8) похоже на уравнение Бете–Солшпитера для электрон-позитронной пары, полученного в квантовой электродинамике. Это не удивительно, поскольку гамильтониан (2) является двумерным аналогом дираковского гамильтониана электрона. В координатном представлении уравнение (8) имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - ((\boldsymbol{\sigma}_e - \boldsymbol{\sigma}_h) \cdot \hat{\mathbf{p}}) - (\sigma_h^z + \sigma_e^z) m \right) \psi(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{R} [Q^{--}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - Q^{++}(\mathbf{r} - \mathbf{R})] V(R) \psi(t, \mathbf{R}), \quad (11)$$

где

$$\hat{\mathbf{p}} = -i \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

— оператор импульса, а $Q^{\pm\pm}(\mathbf{r})$ — фурье образ оператора $\Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p})$:

$$Q^{\pm\pm}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p}). \quad (12)$$

Можно показать, что уравнение (11) имеет сохраняющийся ток с плотностью ρ :

$$\rho = \int d\mathbf{r} (|\psi^{++}(t, \mathbf{r})|^2 - |\psi^{--}(t, \mathbf{r})|^2), \quad (13)$$

где

$$\psi^{\pm\pm}(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{R} Q^{\pm\pm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \psi(t, \mathbf{R}).$$

В импульсном представлении ρ имеет следующий вид:

$$\rho = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \psi^\dagger(t, \mathbf{p}) [\Lambda^{++}(\mathbf{p}) - \Lambda^{--}(\mathbf{p})] \psi(t, \mathbf{p}), \quad (14)$$

где $\psi^\dagger(t, \mathbf{p})$ — это функция, эрмитово сопряженная к функции $\psi(t, \mathbf{p})$. Плотность ρ может быть отрицательной, поэтому величина ρ не может рассматриваться как плотность вероятности, см. [12].

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ МАЛОЙ КОНСТАНТЫ СВЯЗИ

Покажем, что в случае слабого взаимодействия между электроном и дыркой УБС (8) переходит в уравнение Шредингера. Представим функцию $\psi(E, \mathbf{p})$ в следующем виде:

$$\psi(E, \mathbf{p}) = f(\mathbf{p})|1, 1\rangle + h(\mathbf{p})|1, -1\rangle + g(\mathbf{p})|1, 0\rangle + d(\mathbf{p})|0, 0\rangle, \quad (15)$$

где $|\Sigma, \Sigma^z\rangle$ — собственные векторы операторов $(\boldsymbol{\sigma}_e + \boldsymbol{\sigma}_h)^2$ и $(\sigma_e^z + \sigma_h^z)$:

$$(\boldsymbol{\sigma}_e + \boldsymbol{\sigma}_h)^2 |\Sigma, \Sigma^z\rangle = (\Sigma^2 + \Sigma - (\Sigma^z)^2) |\Sigma, \Sigma^z\rangle, \\ (\sigma_e^z + \sigma_h^z) |\Sigma, \Sigma^z\rangle = \Sigma^z |\Sigma, \Sigma^z\rangle.$$

Подставляя функцию $\psi(E, \mathbf{p})$ в виде (15) в уравнение (8), получаем систему уравнений

$$Ef(\mathbf{p}) = 2mf(\mathbf{p}) - \sqrt{2}p^- d(\mathbf{p}) - \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}f)(\mathbf{p}) + \frac{p^-}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \quad (16)$$

$$Eh(\mathbf{p}) = -2mh(\mathbf{p}) + \sqrt{2}p^+ d(\mathbf{p}) + \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}h)(\mathbf{p}) - \frac{p^+}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \quad (17)$$

$$Ed(\mathbf{p}) = \sqrt{2}p^- h(\mathbf{p}) - \sqrt{2}p^+ f(\mathbf{p}) + \frac{p^+}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}f)(\mathbf{p}) - \frac{p^-}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}h)(\mathbf{p}), \quad (18)$$

$$Eg(\mathbf{p}) = 0, \quad (19)$$

где $p^\pm = p_x \pm ip_y$,

$$(\hat{V}f)(\mathbf{p}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|) f(\mathbf{k}). \quad (20)$$

Уравнение для функции $g(\mathbf{p})$ отделилось от системы (16)–(18), кроме того, в случае отличной от нуля энергии $E \neq 0$ функция $g(\mathbf{p})$ равна нулю, поэтому далее мы полагаем $g(\mathbf{p}) = 0$. Разложение системы уравнений (16)–(18) по малой константе связи аналогично нерелятивистскому разложению уравнения Дирака для электрона во внешнем поле [11].

Энергия связи $E - 2m$, характерное значение импульса и потенциал взаимодействия при малой константе связи удовлетворяют следующим условиям [11]:

$$|E - 2m| \ll m, \quad (21)$$

$$\frac{p^2}{m} \ll m, \quad (22)$$

$$\left| \frac{\int d\mathbf{k} f^+(\mathbf{k})(\hat{V}f)(\mathbf{k})}{\int d\mathbf{k} |f(\mathbf{k})|^2} \right| \ll m. \quad (23)$$

При разложении уравнений (16)–(18), как и в соотношении (23), предполагается, что основной вклад в интегралы по переменной $\mathbf{k}$ дает область импульсов $k \ll m$. В случае кулоновского потенциала основной вклад в интегралы дает область $k \sim a_B^{-1}$, где a_B — боровский радиус. Таким образом мы предполагаем, что функции f , h и d убывают достаточно быстро при больших импульсах.

Для соединения WS_2 ширина запрещенной зоны и энергия связи равны $\Delta = 2.41$ эВ, $|E - 2m| = 0.32$ эВ; для WSe_2 — $\Delta = 2.02$ эВ, $|E - 2m| = 0.37$ эВ, см. [15]. Если сравнить энергию связи в этих соединениях с результатами работы [5], то получим, что величина эффективной константы связи порядка 0.5. При таких значениях константы связи точные результаты для энергий связи могут сильно отличаться от результата, полученного в главном приближении. Поэтому необходимо решить задачу точно, либо вычислить поправку к энергии связи. Точное численное решение УБС рассмотрено в разд. 4. В настоящем разделе мы найдем аналитически поправку к энергии связи.

Разложим уравнения (16)–(18) до второго порядка по потенциалу. Для этого подставим энергию E в виде

$$E = 2m + \kappa \quad (24)$$

в (16)–(18), учитывая неравенства (21)–(23), раскладываем величину $\omega(\mathbf{p})$, считая что $p^2/m^2 \ll 1$, удерживаем слагаемые необходимого порядка и получаем

$$\begin{aligned} \kappa f(\mathbf{p}) \approx & -\sqrt{2}p^- d(\mathbf{p}) - \left(1 - \frac{p^2}{2m^2}\right) (\hat{V}f)(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^-}{\sqrt{2}m} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (25)$$

$$h(\mathbf{p}) \approx \frac{p^+ d(\mathbf{p})}{2\sqrt{2}m}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} d(\mathbf{p}) \approx & \frac{p^-}{\sqrt{2}m} h(\mathbf{p}) - \frac{p^+}{\sqrt{2}m} \left(1 - \frac{\kappa}{2m}\right) f(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^+}{2^{3/2}m^2} (\hat{V}f)(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (27)$$

Подстановка функции h в виде (26) в (27), а затем полученного результата для d в (25) приводит к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \kappa f(\mathbf{p}) = & \frac{p^2}{m} f(\mathbf{p}) - (Vf)(\mathbf{p}) - \frac{p^4}{4m^3} f(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^2}{2m^2} (Vf)(\mathbf{p}) - \frac{p^-(Vp+f)(\mathbf{p})}{2m^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

В этом уравнении удержаны слагаемые, имеющие необходимый порядок точности. Видно, что оператор в правой части не является эрмитовым. Причина в том, что функция $f(\mathbf{p})$ не является волновой функцией уравнения Шредингера, поскольку условие её нормировки отличается от нормировки шредингеровской волновой функции, см. [11]. Для того чтобы получить гамильтониан, мы должны перейти к новой функции.

Волновая функция $\psi(E, \mathbf{p})$ нормирована условием (14), которое с необходимой точностью принимает следующий вид:

$$\rho \approx \int d\mathbf{p} \left(1 + \frac{p^2}{2m^2}\right) |f(\mathbf{p})|^2. \quad (29)$$

Поэтому, подставляя функцию f в виде

$$f(\mathbf{p}) = \left(1 - \frac{p^2}{4m^2}\right) \psi_{Sh}(\mathbf{p}), \quad (30)$$

в уравнение (29), получаем с необходимой точностью следующее выражение для плотности ρ :

$$\rho = \int d\mathbf{p} |\psi_{Sh}(\mathbf{p})|^2. \quad (31)$$

Видно, что сохраняющаяся плотность ρ (31) совпадает с плотностью для уравнения Шредингера. Подставляя функцию f в виде (30) в (28), затем выполняя преобразование Фурье, мы получаем уравнение Шредингера для функции ψ_{Sh} в координатном представлении:

$$\kappa \psi_{Sh}(\mathbf{r}) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \psi_{Sh}(\mathbf{r}), \quad (32)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - V(\mathbf{r}). \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = & -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{4m^3 v_0^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2 v_0^2} (\nabla^2 V) + \\ & + \frac{i\hbar^2}{2m^2 v_0^2} [(\nabla V) \times \nabla]_z. \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$, $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]$ — векторное произведение. В уравнении (32) мы восстановили размерность. Оператор $\hat{H}_0$ является гамильтонианом частицы с массой $m/2$, находящейся в потенциале $-V(\mathbf{r})$. Знак минус перед потенциалом связан с тем, что $V(\mathbf{r})$ — потенциал электрон-электронного взаимодействия. Гамильтониан $\hat{H}_1$ является эрмитовым оператором. Отметим, что уравнение (32) было получено ранее в работах [4, 9] при разложении

другого уравнения, а именно уравнения Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц.

Рассмотрим решения уравнения (32) в случае кулоновского потенциала

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (35)$$

где e — заряд электрона, ϵ — коэффициент диэлектрической проницаемости. Собственные функции и собственные значения гамильтониана $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ можно найти с необходимой точностью, используя теорию возмущений. Представим $\varkappa$ и $\psi_{Sh}(\mathbf{r})$ в виде

$$\varkappa = \varkappa^{(0)} + \delta\varkappa \quad \text{и} \quad \psi_{Sh}(\mathbf{r}) = \psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) + \delta\psi_{Sh}(\mathbf{r}),$$

где индекс (0) обозначает лидирующий вклад, а $\delta\varkappa$ и $\delta\psi_{Sh}(\mathbf{r})$ — отвечают поправкам, связанным с гамильтонианом $\hat{H}_1$. В лидирующем порядке теории возмущений имеем [6]

$$\varkappa_{n,l}^{(0)} = -\frac{m\alpha^2}{4(n+|l|+1/2)^2}, \quad (36)$$

$$\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}a_B} e^{-r/a_B}, \quad (37)$$

где n — радиальное квантовое число, l — азимутальное квантовое число, $\alpha = e^2/\epsilon$ — безразмерная константа связи, $a_B = 1/(m\alpha)$ — боровский радиус.

Поправка $\delta\varkappa_{0,0}$ к энергии основного состояния $\varkappa_{0,0}^{(0)}$ имеет вид

$$\delta\varkappa_{0,0} = \int d^2r \left(\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) \right)^\dagger \hat{H}_1 \psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (38)$$

Поскольку $\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r})$ не равна нулю в точке $r = 0$, интеграл (38) в случае кулоновского потенциала расходится логарифмически на малых расстояниях:

$$\delta\varkappa_{0,0} \propto \int_0 \frac{dr}{r}, \quad (39)$$

см. [9]. В работе [9] для вычисления поправки $\delta\varkappa$, связанной с $\hat{H}_1$, авторы ввели параметр регуляризации на малых расстояниях. Поэтому поправка зависит от этого параметра. Параметр невозможно найти в рамках описания взаимодействия электрона и дырки с помощью уравнения Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц. Отметим, что гамильтониан, подобный $\hat{H}_1$, возникает при разложении трехмерного уравнения Дирака для частицы в кулоновском поле. Однако никаких особенностей при вычислении поправок к энергиям в трехмерной задаче не возникает [11]. Сложности возникают из-за того, что электроны двигаются в двух

измерениях, а кулоновское поле распространяется в трех измерениях. Это приводит к тому, что потенциал на малых расстояниях ведет себя как $1/r$ вместо $\ln r$. Для потенциалов, сингулярность которых меньше чем $1/r$ при $r \rightarrow 0$, можно использовать разложение (32) и поправка $\delta\varkappa$ не будет содержать внешнего параметра регуляризации. Для кулоновского потенциала разложение УБС необходимо дополнить аккратнее.

Расходимость интеграла (38) на малых расстояниях для состояний $l = 0$ означает, что расстояния $r \ll a_B$ (большие импульсы $p \gg 1/a_B$) дают вклад в поправку. Как следствие, предположение, что основной вклад в интегралы в уравнениях (16)–(18) набирается в области малых импульсов, не является верным. Поэтому для вычисления поправки порядка α^4 к основному состоянию экситона необходимо учесть вклад области $k \lesssim m$ в интегралах, содержащихся в уравнениях (16)–(18).

3.1. Случай кулоновского потенциала

Для поиска поправок порядка α^4 к уровням, отвечающим $l = 0$, мы подставляем функции $f(\mathbf{p})$, $h(\mathbf{p})$ и $d(\mathbf{p})$ в виде

$$f(\mathbf{p}) = f(p), h(\mathbf{p}) = h(p)e^{2i\phi_p}, d(\mathbf{p}) = d(p)e^{i\phi_p} \quad (40)$$

в уравнения (16)–(18) и находим

$$Ef(p) = 2mf(p) + \frac{p^2}{m}(f(p) + h(p)) - \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} \times \\ \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(P) \left(f(k) + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2} (f(k) + h(k)) \right), \quad (41)$$

$$Eh(p) = -2mh(p) - \frac{p^2}{m}(f(p) + h(p)) + \\ + \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(P) \left(h(k) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})^2 - [\mathbf{p} \times \mathbf{k}]^2}{p^2 k^2} + \right. \\ \left. + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2} (f(k) + h(k)) \right), \quad (42)$$

$$d(p) = -\frac{p}{\sqrt{2}m}(f(p) + h(p)), \quad (43)$$

где $P = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$, ϕ_p — угол вектора $\mathbf{p}$. При получении уравнений (41)–(43) мы преобразовали два последних слагаемых в правой части (18), используя уравнения (16) и (17), затем полученный результат для функции $d(p)$ подставили в (16) и (17). Видно, что уравнения (41) и (42) не содержат функции $d(p)$. Кроме того, функция $d(p)$ элементарно выражается через $f(p)$ и $h(p)$. Поэтому далее мы будем рассматривать только уравнения (41) и (42).

В правой части уравнений (41), (42) содержатся неэрмитовы операторы типа $(1/\omega(\mathbf{p})) \int d\mathbf{k} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|)$. Подставляя функции f и h в виде

$$f(p) = \sqrt{\frac{m}{\omega(p)}} a(p), \quad h(p) = \sqrt{\frac{m}{\omega(p)}} b(p), \quad (44)$$

а энергию E в виде (24) в уравнения (41), (42), получаем

$$\begin{aligned} \varkappa a(p) = & \frac{p^2}{m}(a(p) + b(p)) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) a(k) - \\ & - \frac{1}{2m^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(a(k) + b(k)), \quad (45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b(p) = & -\frac{\varkappa}{4m} b(p) - \frac{p^2}{4m^2}(a(p) + b(p)) + \\ & + \frac{1}{4m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})^2 - [\mathbf{p} \times \mathbf{k}]^2}{p^2 k^2} b(k) + \\ & + \frac{1}{8m^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(a(k) + b(k)), \quad (46) \end{aligned}$$

где введено обозначение

$$\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \frac{m}{\sqrt{\omega(p)\omega(k)}} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|). \quad (47)$$

Оператор $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ удовлетворяет условию $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \tilde{V}(\mathbf{k}, \mathbf{p})$, поэтому операторы в правой части уравнений (45), (46) являются эрмитовыми. Видно, что функция $\tilde{V}$ убывает быстрее, чем функция $V(\mathbf{p})$ при больших импульсах $p \gg m$. Это свойство и позволяет нам вычислить поправку порядка α^4 к энергиям $\varkappa_{n,0}^{(0)}$.

С необходимой точностью уравнение для функции $b(p)$ имеет вид

$$b(p) = -\frac{p^2}{4m^2} a(p).$$

Подставляя функцию $b(p)$ в уравнение (45) и удерживая слагаемые порядка p^4/m^2 , получаем уравнение для функции $a(p)$:

$$\begin{aligned} \varkappa a(p) = & \frac{p^2 a(p)}{m} - \frac{p^4 a(p)}{4m^3} - \\ & - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \left(1 + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2}\right) a(k). \quad (48) \end{aligned}$$

Мы решаем уравнение (48), используя теорию возмущений. Для этого подставляем величины $\varkappa$ и a в виде

$$\varkappa = \tilde{\varkappa} + \delta\varkappa, \quad (49)$$

$$a(p) = \tilde{a}(p) + \delta a(p) \quad (50)$$

в (48) и получаем следующие уравнения для функции $\tilde{a}(p)$ и поправки $\delta\varkappa$:

$$\tilde{\varkappa} \tilde{a}(p) = \frac{p^2 \tilde{a}(p)}{m} - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{a}(k), \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \delta\varkappa = & - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} - \\ & - \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \tilde{a}(p) \tilde{a}(k)}{2m^2}. \quad (52) \end{aligned}$$

Здесь предполагается, что функция $\tilde{a}(p)$ нормирована на единицу. Выполняя стандартные, но громоздкие вычисления, получаем следующий результат для $\tilde{\varkappa}$:

$$\tilde{\varkappa} = -m\alpha^2 + m\alpha^4 \left(-4 + \frac{\pi}{2} + 3 \ln 2 + 2 \ln \frac{1}{\alpha}\right). \quad (53)$$

Перейдем к вычислению поправки (52). Пользуясь уравнением (51), мы выражаем действие оператора p^2 на функцию $\tilde{a}(p)$ и получаем

$$\begin{aligned} - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} = & -\frac{1}{4m} \left(\tilde{\varkappa}^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \tilde{a}^2(p) + \right. \\ & + 2\tilde{\varkappa} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{a}(p) \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{a}(k) + \\ & \left. + \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \tilde{a}(k) \tilde{a}(q) \right). \quad (54) \end{aligned}$$

Первое слагаемое в скобках вычисляется тривиально в силу нормировки функции $\tilde{a}(p)$. Второе слагаемое уже содержит параметр $\tilde{\varkappa}$ перед интегралом, поэтому нам необходимо вычислить интеграл с точностью α^2 . Видно, что интегралы по переменным p и k сходятся на масштабах порядка $1/a_B$, поэтому с необходимой точностью мы заменяем $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ на $V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|) = 2\pi\alpha/|\mathbf{p} - \mathbf{k}|$, а функцию $\tilde{a}(p)$ на

$$\tilde{a}_0(p) = \frac{2\sqrt{2\pi} a_B}{(1 + p^2 a_B^2)^{3/2}},$$

которая является фурье-образом функции (37) для основного состояния ($n = l = 0$), а также нулевым приближением для решения уравнения (51). После таких преобразований вычисление второго слагаемого становится тривиальным. Для вычисления третьего слагаемого преобразуем его к следующему виду:

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{m}{\sqrt{p^2 + m^2}} \left[\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{2\pi\alpha\sqrt{m}\tilde{a}(k)}{|\mathbf{p} - \mathbf{k}|(k^2 + m^2)^{1/4}} \right]^2. \quad (55)$$

Сходимость интеграла по переменной k при больших k ($k \gg 1/a_B$) и произвольном импульсе p опре-

деляется только функцией $\tilde{a}(k)$. Поэтому в интеграле по k с необходимой точностью мы подставляем $\tilde{a}_0(k)$ вместо $\tilde{a}(k)$, пренебрегаем k по сравнению с m , вычисляем интеграл, затем переходим к переменной $\mathbf{p} = \mathbf{x}/a_B$, интегрируем по углу вектора $\mathbf{x}$ и получаем

$$\frac{4m^2\alpha^3}{a_B} \int_0^\infty \frac{dx x}{(x^2 + 1)\sqrt{x^2 + \alpha^{-2}}}. \quad (56)$$

Здесь мы учли, что $a_B = 1/(m\alpha)$. Поскольку $\alpha \ll 1$, мы вычисляем интеграл (56) методом шивки и получаем следующий результат для третьего слагаемого:

$$4m^2\alpha^4(\ln 2 - \ln \alpha). \quad (57)$$

Складывая результаты для всех слагаемых, получаем, что с необходимой точностью

$$-\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} = -m\alpha^4 \left(\ln 2 - \ln \alpha - \frac{3}{4} \right). \quad (58)$$

Для вычисления второго слагаемого в правой части выражения (52) найдем масштабы, которые дают основной вклад в интеграл. Поскольку интеграл содержит скалярное произведение в числителе, вклад областей, в которых один из импульсов по модулю много больше другого, подавляется при интегрировании по углам. Это означает, что основной вклад в интеграл дает область $p \sim k$. Если мы подставим $\tilde{a}_0$ вместо $\tilde{a}$ и $V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|)$ вместо $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$, то интеграл при больших импульсах сходится, поскольку в числителе стоит шестая степень импульса, а в знаменателе седьмая. Поэтому большие импульсы вклада не дают и с необходимой точностью мы действительно можем сделать подобные замены. Интеграл набирается в области $p, k \sim 1/a_B$. Вычисляя интеграл с необходимой точностью, получаем

$$-\int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \tilde{a}(p) \tilde{a}(k)}{2m^2} = -m\alpha^4. \quad (59)$$

Отметим, что область $p, k \sim m$ приводит к поправкам порядка α^6 .

Складывая результаты (58) и (59) мы получаем

$$\delta\kappa = -m\alpha^4 \left(\ln \frac{1}{\alpha} + \ln 2 + \frac{1}{4} \right). \quad (60)$$

Таким образом, энергия основного состояния $E_{0,0}$ в лидирующем и следующим за лидирующем порядках по параметру α имеет вид

$$\begin{aligned} E_{0,0} &= 2m + \kappa = \\ &= 2m - m\alpha^2 \left(1 - \alpha^2 \left[\ln \frac{1}{\alpha} + \frac{\pi}{2} + \ln 4 - \frac{17}{4} \right] \right). \end{aligned} \quad (61)$$

Первое слагаемое в круглых скобках совпадает с результатом (36), второе слагаемое — поправка. Заметим, что выражение в квадратных скобках содержит логарифмический вклад $\ln \alpha$, который набирается в области интегрирования $a_B^{-1} \ll k \ll m$. Отметим, что логарифмический вклад $\alpha^4 \ln \alpha$ совпадает с результатом, полученным в [9].

Выполняя похожие вычисления, мы получаем следующее выражение для состояния, имеющего квантовые числа $n = 1, l = 0$:

$$\begin{aligned} E_{1,0} &= 2m + \kappa_{1,0} = \\ &= 2m - \frac{m\alpha^2}{9} \left(1 - \frac{\alpha^2}{3} \left[\ln \frac{12}{\alpha} + \frac{\pi}{2} - \frac{23}{4} \right] \right). \end{aligned} \quad (62)$$

Видно, что этот результат также содержит логарифмическое слагаемое $\ln \alpha$.

Отметим, что результаты (61) и (62) не содержат параметров регуляризации. Это связано с тем, что на расстояниях $r \sim 1/m$ эффективный потенциал взаимодействия отличается от кулоновского и является менее сингулярным.

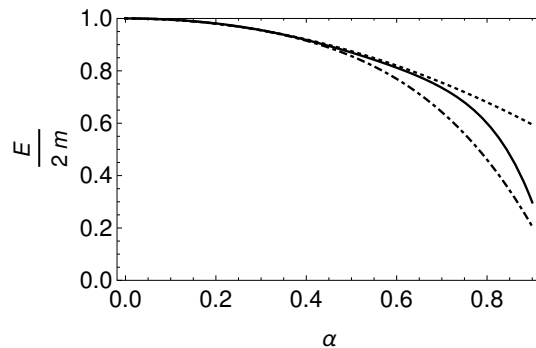


Рис. 1. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α для основного состояния. Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии отвечают соответственно точному решению уравнения Бете–Солпитера, нулевому приближению (36) и результату (61)

Результаты (61) и (62) изображены на рис. 1 и 2 штрихпунктирной линией. Видно, что аналитические результаты хорошо согласуются с точными численными расчетами вплоть до $\alpha \lesssim 0.5$. Однако для параметров $\alpha > 0.5$ необходимо учитывать поправки более высоких порядков по параметру α .

4. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УБС ДЛЯ СЛУЧАЯ $l = 0$

Для численного решения УБС волновую функцию $\psi(\mathbf{p})$ удобно представить в следующем виде:

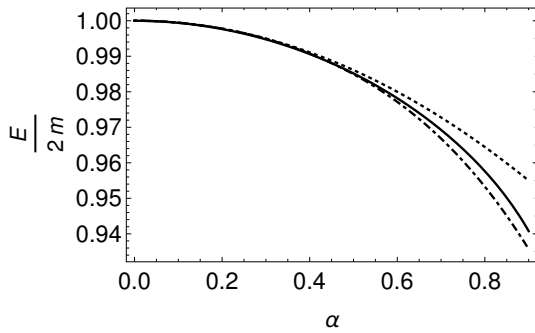


Рис. 2. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α для состояния с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии отвечают соответственно точному решению уравнения Бете–Солпитера, нулевому приближению (36) и результату (62)

$$\psi(E, \mathbf{p}) = \frac{F(p) + H(p)}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle + e^{i\phi_{\mathbf{p}}} d(p) |0, 0\rangle + e^{2i\phi_{\mathbf{p}}} \frac{F(p) - H(p)}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle, \quad (63)$$

где $\phi_{\mathbf{p}}$ — угол вектора $\mathbf{p}$. Подстановка этой функции в уравнение (8) приводит к следующей системе уравнений:

$$\frac{E}{2m} F(p) = H - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{V(P)}{2\omega(p)} [s^2 F(k) + c^2 H(k)], \quad (64)$$

$$\frac{E}{2m} H(p) = F + \frac{p^2}{m^2} F - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) V(P)}{2m^2 \omega(p)} F(k) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{V(P)}{2\omega(p)} [c^2 F(k) + s^2 H(k)], \quad (65)$$

$$d(p) = -\frac{p}{m} F(p). \quad (66)$$

Здесь для краткости введены следующие обозначения:

$$s^2 = \frac{pk - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2pk},$$

$$c^2 = \frac{pk + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2pk}.$$

Как и ранее, уравнение для функции $d(p)$ отделилось, поэтому далее мы рассматриваем только функции $F(p)$ и $H(p)$.

Мы решим уравнения (64) и (65) для кулоновского потенциала (35) и локализованного потенциала, не имеющего особенности в точке $r = 0$:

$$V(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}, \quad (67)$$

где U_0 и R — соответственно глубина и характерная ширина потенциала. В импульсном представлении этот потенциал имеет вид

$$V(\mathbf{p}) = \pi U_0 R^2 \exp\{-R^2 p^2/4\}. \quad (68)$$

4.1. Кулоновский потенциал

Для повышения точности численного решения интегральных уравнений мы выделяем асимптотическое поведение $F(p)$ и $H(p)$ при больших импульсах $p \gg m$. Для этого подставляем $F(p)$ и $H(p)$ в виде

$$F(p) = A_1/p^{2\beta}, \quad H(p) = A_2/p^{2\beta_1} \quad (69)$$

в уравнения (64), (65). Здесь A_1 и A_2 — некоторые константы. Удерживая лидирующие асимптотики, получаем уравнения для показателей β и β_1 :

$$\frac{\Gamma(\beta - 1/2) \Gamma(2 - \beta)}{\Gamma(\beta) \Gamma(5/2 - \beta)} = \frac{4}{\alpha}, \quad (70)$$

$$\frac{\Gamma(\beta_1 - 1/2) \Gamma(1 - \beta_1)}{\Gamma(\beta_1) \Gamma(3/2 - \beta_1)} = \frac{8}{\alpha}, \quad (71)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера. В лидирующем и следующем за лидирующим приближении по параметру α решения этих уравнений имеют вид

$$\beta \approx 2 - \frac{\alpha}{8}, \quad \beta_1 \approx 1 - \frac{\alpha}{8}. \quad (72)$$

Мы не будем описывать детали численного решения системы уравнений (64)–(66). Укажем лишь на то, что для численного решения удобно явно выделить асимптотическое поведение функций, переходя к новым функциям:

$$F(p) = \frac{\tilde{F}(p)}{(m^2 + p^2)^\beta}, \quad H(p) = \frac{\tilde{H}(p)}{(m^2 + p^2)^{\beta_1}}. \quad (73)$$

Функции $\tilde{F}(p)$ и $\tilde{H}(p)$ стремятся к некоторым константам при больших импульсах $p \gg m$. Далее мы приведем лишь полученные результаты для энергий связанных состояний частицы и дырки.

Найденная зависимость энергии основного состояния экситона при различных α представлена на рис. 1 и 3. Можно заметить, что точное решение для величины $E/2m$ существенно отличается от результата (36) при $\alpha > 0.7$. Мы обнаружили, что энергия основного состояния достигает валентной зоны ($E = -2m$) при $\alpha = 1 \pm 0.05$. Неопределенность связана с сильной зависимостью результата для уровня энергии от шага дискретизации при численном вычислении интегралов. С нашей точностью можно сказать, что критическое значение константы связи $\alpha_c = 1$. Вдали от критического значения константы связи результаты для энергии уровня слабо зависят от шага дискретизации. При $\alpha > \alpha_c$ энергетический уровень, отвечающий квантовым числам $n = l = 0$ исчезает из дискретного спектра,

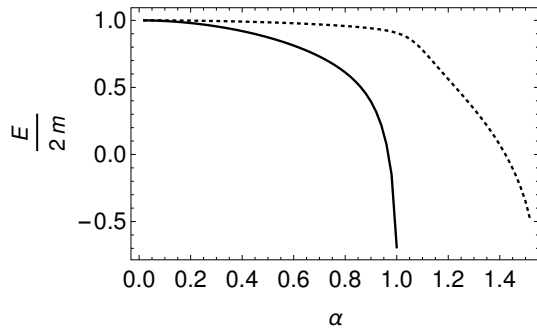


Рис. 3. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α . Сплошная линия соответствует состоянию с квантовыми числами $n = l = 0$. Пунктирная линия — $n = 1, l = 0$

см. рис. 3. Кроме того, на рис. 3 изображена зависимость $E(\alpha)$ для состояния с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Видно, что когда параметр α становится больше единицы, основным состоянием становится состояние с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Такое поведение аналогично поведению электрон-позитронной пары в квантовой электродинамике. Строго говоря, при достижении α критического значения вакуум становится нестабильным и начинают происходить процессы рождения пар частица-дырка, поэтому не имеет смысла рассматривать области $\alpha \geq \alpha_c$.

4.2. Локализованный потенциал

Для исследования поведения уровней энергии вблизи критического значения константы связи мы рассмотрели модельный локализованный потенциал (67). На рис. 4 изображена зависимость отно-

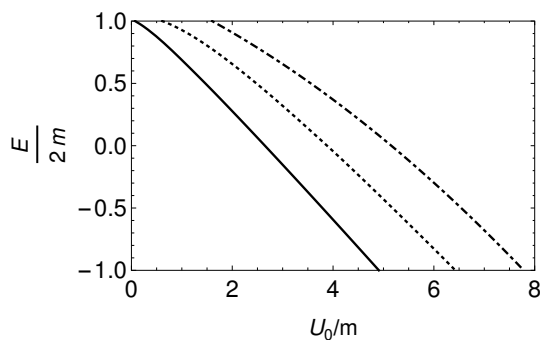


Рис. 4. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра U_0 при $R = 5\hbar/m$. Сплошная линия отвечает состоянию с квантовыми числами $n = 0, l = 0$. Пунктирная — $n = 1, l = 0$. Штрихпунктирная — $n = 2, l = 0$

шения $E/2m$ от величины U_0/m для трех нижних уровней энергии при фиксированном радиусе $R = 5\hbar/m$. Видно, что при увеличении глубины потенциала положение уровней энергии плавно изменяется от $E = 2m$ до $E = -2m$. Нижний уровень

достигает $-2m$ при $\tilde{U} = \tilde{U}_c$. Видно, что для экспоненциального потенциала наклон функции $E(\tilde{U})$ остается конечным в отличие от поведения уровня в случае кулоновского потенциала. Такое поведение связано с тем, что локализованный потенциал регулярен при $r \rightarrow 0$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы исследовали взаимодействие электрона и дырки в двумерных диэлектриках переходных металлов. Для этого мы решили уравнение Бете–Солпитера, полученное в лидирующем приближении по потенциалу взаимодействия. Мы нашли зависимость нескольких нижних уровней энергии экситона от константы взаимодействия.

Как и авторы работ [4], мы показали, что в лидирующем приближении разложение уравнения Бете–Солпитера и разложение уравнения Шредингера для двух дираковских частиц совпадают. Мы обнаружили, что для потенциалов, сингулярность которых меньше чем $1/r$, разложения в следующем за лидирующим приближении также совпадают. Однако для кулоновского потенциала результаты существенно различаются. Так, в уравнении Шредингера возникают сингулярные операторы, тогда как УБС не содержит таковых. В случае кулоновского потенциала, используя разложение уравнения Бете–Солпитера (48) при малых константах связи, мы аналитически вычислили энергии основного и первого возбужденного состояний с точностью α^4 включительно. Было найдено, что в порядке α^4 результаты для энергий содержат слагаемые $\alpha^4 \ln \alpha$, которые набираются в области интегрирования по импульсам $a_B^{-1} \ll p \ll m$, этот результат совпал с результатами работы [9].

Мы численно исследовали поведение энергий связи электрона и дырки для кулоновского потенциала и локализованного потенциала. Получили, что для кулоновского потенциала критическое значение константы связи равно единице, $\alpha_c = 1$. Мы также показали, что в случае локализованного потенциала при увеличении глубины потенциала значения уровней энергии плавно изменяются от $2m$ до $-2m$. При достижении валентной зоны уровни исчезают из дискретного спектра. Такое поведение аналогично поведению уровней энергии электрона в потенциале, см., например, [17].

В заключение отметим, что найденные нами поправки к энергии экситона порядка α^4 не являются единственными. Существуют поправки такого же порядка, связанные с изменением потенциала на

малых расстояниях (потенциал Юлинга), а также с диаграммами типа «кросс-бокс». Подобные поправки не рассматривались в данной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
2. Z. Y. Zhu, Y. C. Cheng, and U. Schwingenschlögl, *Phys. Rev. B* **84**, 153402 (2011).
3. A. S. Rodin and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **88**, 195437 (2013).
4. J. Zhou, W.-Y. Shan, W. Yao, and D. Xiao, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 166803 (2015).
5. M. Trushin, M. O. Goerbig, and W. Belzig, *Phys. Rev. B* **94**, 041301(R) (2016).
6. M. Trushin, M. O. Goerbig, and W. Belzig, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 187401 (2018).
7. M. Trushin, *Phys. Rev. B* **99**, 205307 (2019).
8. B. Scharf, D. V. Tuan, I. Zutic, and H. Dery, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 203001 (2019).
9. N. V. Leppenen, L. E. Golub, and E. L. Ivchenko, *Phys. Rev. B* **102**, 155305 (2020).
10. M. F. C. Martins Quintela, J. C. G. Henriques, N. M. R. Peres, *Phys. Stat. Sol. B*, 2200097 (2022).
11. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984).
12. C. Itzykson, and J.-B. Zuber, *Quantum field theory*, McGraw-Hill (1980).
13. G. F. Glinskii and Zl. Koinov, *Theor. Math. Phys.* **70**, 252 (1987).
14. D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 196802 (2012).
15. A. Chernikov, T. C. Berkelbach, H. M. Hill et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 076802 (2014).
16. K. He, N. Kumar, L. Zhao, Z. Wang, K. F. Mak, H. Zhao, and J. Shan, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 026803 (2014).
17. А.И. Ахиейзер, В.Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1981).

ЖИДКОСТЬ ЛАТТИНЖЕРА С ПРИТЯЖЕНИЕМ И ОДНОЙ ПРИМЕСЬЮ: ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

В. В. Афонин *

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

Поступила в редакцию 9 июня 2022 г.,
после переработки 29 августа 2022 г.
Принята к публикации 29 августа 2022 г.

Изучается точное решение для задачи рассеяния одномерных притягивающихся фермионов на точечной примеси, существующее в модели Кейна–Фишера при параметре Латтинжера равном 2. Получено выражение для частотной зависимости коэффициента отражения фермионов от примеси, показывающее невозможность экстраполяции ответов для относительно слабого фермион-фермионного взаимодействия в область констант связи порядка единицы.

DOI: 10.31857/S0044451023020104

EDN: OQVINH

1. ВВЕДЕНИЕ

История изучения одномерных систем со взаимодействующими носителями началась с работ Томонаго [1] еще в 1950-х годах. Первоначально такие системы рассматривались как простейшие модели для сильновзаимодействующих фермионов в релятивистских теориях [2, 3]. Интерес теоретиков к одномерным системам в этом случае стимулировался тем, что они являлись простейшими моделями с «невыветанием» частиц. Позднее, по мере совершенствования технологий, изучение транспортных свойств одномерных каналов получило и экспериментальный интерес в физике твердого тела. Прогресс в теории, описывающей транспортные свойства баллистических каналов, в значительной степени был обусловлен тем, что задача в этом случае является точно решаемой. Одновременно с этим стало понятно, что примесное рассеяние кардинально меняет картину транспортных явлений в одномерных проводниках. Простейшей моделью с примесным рассеянием является баллистический канал с имплантированной точечной примесью. В рамках имеющихся на сегодня представлений такая задача уже не может быть решена точно. Для ее решения

требуется использовать подходы, развитые при построении теории элементарных частиц. Можно сказать, что теория одномерных сильно взаимодействующих фермионов является одной из немногих задач теоретической физики, интересных с точки зрения как теории поля, так и физики твердого тела.

К настоящему времени достигнуто хорошее понимание явлений, происходящих в чистых одномерных каналах. Этого нельзя сказать о каналах с примесями. Даже в простейшей задаче с одной точечной и упругой примесью подавляющее большинство работ относится к случаю слабого фермион-фермионного ($e-e$) взаимодействия:

$$\nu \ln(\mathcal{M}/|\omega|) \leq 1, \quad \ln(\mathcal{M}/|\omega|) \gg 1, \quad (1)$$

где $\mathcal{M}$ — параметр ультрафиолетового обрезания, ω — частота внешнего поля, $\nu = 1/v_c - 1$, а $v_c = \sqrt{1 + V_0/\pi} < 1$ — перенормированная скорость Ферми. В физике твердого тела вместо перенормированной скорости v_c часто используется параметр Латтинжера (K), равный $1/v_c$. (Рассматривается простейшая из возможных задач: однокомпонентные притягивающиеся фермионы и точечное $e-e$ -взаимодействие ($V_{e-e} = V_0\delta(x-y)$). Все скорости измеряются в единицах скорости Ферми, $\hbar = 1$.)

В низшем порядке по параметру (1) (область теории возмущений) поправки к кондактансу в латтинжеровской жидкости (LL) впервые были вычислены в работах [4, 5]. Позднее, в рамках ренормгруппового (РГ) подхода, тоже предполагающего

* E-mail: vasil.afonin@mail.ioffe.ru

выполнение условий (1), были получены выражения для кондактанса, учитывающие вклады порядка $\nu^n \ln^{n-m}(\mathcal{M}/|\omega|)$, $m = 0, 1, 2$ [6–8]. Случай сильного ($\nu \sim 1$) e – e взаимодействия обсуждался

- для отталкивающихся фермионов: работы [4, 9], в которых было рассмотрено точное решение для LL с отталкиванием и одной точечной примесью, существующее при $v_c = 2$, и цикл работ, использующих термодинамический анзац Бете (см. [10] и ссылки в ней);
- для LL с притяжением: в работе [11] было получено выражение для первой поправки к $|\mathcal{R}_\omega|^2$, справедливое при $|R_0|^2 \rightarrow 0$ и $\nu \leq 1/2$ (R_0 — затравочный коэффициент отражения фермионов от примеси, а $\mathcal{R}_\omega$ — с учетом e – e взаимодействия).

В процитированных выше статьях был применен разный подход к решению этой задачи. В работах [7, 11] проводилась шпивка решений нелинеаризованного уравнения Шредингера в точке расположения примеси. Необходимость такого подхода диктуется тем, что на масштабе точечной примеси ($\sim 1/p_F$) разделение полной волновой функции фермиона на волновую функцию правого (Ψ_R) и левого (Ψ_L) фермионов невозможно. При таком способе вычислений автоматически учитывается существование после рассеяния носителя на примеси как отраженной, так и прошедшей волн. В работах [4, 5, 9] примесное рассеяние описывалось с помощью туннельного гамильтониана [12]: в уже линеаризованное уравнение Шредингера вводилось слагаемое, описывающее переход правых фермионов в левые и не содержащее прошедшую волну. (Далее мы будем называть такой подход гамильтонианом Кейна–Фишера; КФ-гамильтониан.) Получающийся в первом подходе эффективный гамильтониан, в котором в качестве полевой переменной была взята фаза рассеяния фермионов на примеси, качественно отличается от КФ-гамильтониана. Он нелокален и содержит бесконечное количество слагаемых. Соответственно, система уравнений Гелл-Мана–Лоу в этом случае оказывается бесконечной [8, 11]. Это не помешало доказать перенормируемость теории, сформулировать РГ-подход так, чтобы наблюдаемые величины зависели в каждом порядке по t только от t констант связи и решить все эти системы уравнений. Однако оба этих подхода приводили к одним и тем же частотным зависимостям в наблюдаемых величинах при $\nu \ll 1$. Отличие ответов для кондактанса в работах [8] и [7], начиная с двухпетлевого при-

ближения ($t = 1$), возникало не от разницы в подходах, а от неприменимости анзаца Андерсона, использованного в [7]. В такой ситуации важно сравнить результаты, следующие из нелокального и КФ-гамильтонианов, и при $\nu \sim 1$. Это представляется интересным еще и потому, что одним из предсказаний работы [11] является то, что для притягивающихся фермионов в точке $\nu = 1/2$ инфракрасная расходимость в выражении для $|\mathcal{R}_\omega|^2$ должна смениться на ультрафиолетовую, и при более сильном взаимодействии кондактанс должен быть пропорциональным $|\omega|$. (А не $|\omega|^{2\nu}$, как это следовало бы из экстраполяции ответов для слабого e – e взаимодействия в область $\nu \sim 1$.) Сравнение результатов оказывается возможным потому, что гамильтониан КФ является точно решаемым и при $v_c = 1/2$ [13]. (Дуальность теорий с отталкиванием ($v_c = 2$) и притяжением ($v_c = 1/2$) для гамильтонианов КФ не доказана, и они не переходят друг в друга при замене $v_c \leftrightarrow 1/v_c$ [13].) Кроме того, новое точное решение задачи в области сильного e – e взаимодействия всегда представляет самостоятельный интерес.

Результаты вычислений, сделанных в этой работе, подтверждают выводы статьи [11]: при $v_c = 1/2$ выражение для кондактанса оказывается пропорциональным $|\omega|$ и в модели Кейна–Фишера, т.е. не совпадает с экстраполяцией ответа для случая слабого e – e взаимодействия в область $\nu \sim 1$. (Последняя привела бы к зависимости $|\omega|^2$.) Как и в подходе с нелокальным гамильтонианом, это получается из-за существования ультрафиолетовой расходимости в выражении для кондактанса. Сам факт существования такой расходимости сразу гарантирует уменьшение степени частоты в выражении для кондактанса, так как ответ зависит только от двух величин с размерностью энергии: $\mathcal{M}$ и ω . Поэтому появление расходимости, связанной с ультрафиолетовым обрезанием, по размерным соображениям означает уменьшение степени частоты. Появляющийся при этом расходящийся множитель должен быть спрятан в перенормированную (за счет сильного взаимодействия в ультрафиолетовой области) амплитуду рассеяния носителей на примеси. С физической точки зрения понижение степени частоты связано с тем, что на временах $t \leq 1/\mathcal{M}$ энергия фермиона плохо определена, так что говорить о законе сохранения энергии при рассеянии на упругой примеси в такой ситуации не представляется возможным. В случае сильного взаимодействия из-за существования ультрафиолетовой расходимости эти времена дают главный вклад в кондактанс. (Это качественно отличает случай сильного e – e взаимодействия при

$v_c = 1/2$ от области теории возмущений. В последней ответ определяется большими временами, что при условии выполнения (1) давало возможность применить скейлинговый подход.) Вклад от больших времен, на которых закон сохранения энергии выполняется, в случае сильного взаимодействия тоже существует, но он конечен и поэтому теряется на фоне расходящегося ответа в процессе перенормировки.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 с использованием формализма тождеств Уорда получено выражение для величины тока в подходе Кейна–Фишера. В разд. 3 обсуждается вопрос о переходе в представление нормальных квазичастиц в гамильтониане Кейна–Фишера, приводящий к точно решаемой задаче при $v_c = 1/2$, и получено ее решение. Раздел 4 посвящен вычислению коэффициента отражения фермионов от примеси. Все сколько-нибудь громоздкие с математической точки зрения вычисления, не требующие физического обсуждения, вынесены в Приложения.

2. ТОЖДЕСТВА УОРДА ДЛЯ ГАМИЛЬТОНИАНА КЕЙНА–ФИШЕРА

Тождества Уорда играют важную роль при построении любой теории, так как они связывают между собой матричные элементы, описывающие наблюдаемые величины. Эти связи являются проявлением фундаментальных законов, существующих в задаче (таких как законы сохранения, калибровочная инвариантность и т.д.). В этом разделе мы будем считать, что все операторы поля записаны в гайзенберговском представлении.

Туннельный гамильтониан, предложенный в [4] для описания рассеяния взаимодействующих одномерных фермионов с примесью и являющийся сейчас почти общепринятым для нашей задачи, состоит из двух частей

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ee} + \mathcal{H}_{imp},$$

где $\mathcal{H}_{ee}$ — гамильтониан взаимодействующих фермионов, равный

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e-e} = & \int dx [\hat{\Psi}_R^\dagger(x)(-i\partial_x)\hat{\Psi}_R(x) + \hat{\Psi}_L^\dagger(x)(i\partial_x)\hat{\Psi}_L(x)] + \\ & + \int dx dy \hat{\rho}(x)V_{e-e}(x-y)\hat{\rho}(y). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\hat{\rho}$ — оператор электрического заряда фермионной системы, а $\mathcal{H}_{imp}$ описывает примесную часть рассеяния носителей тока:

$$\mathcal{H}_{imp} = \int dx dy V_{imp}(x, y) [\Psi_R^\dagger(x)\Psi_L(y) + hc]. \quad (3)$$

Он был впервые использован Дж.Бардиным [12] для вычисления матричных элементов перехода между двумя проводящими областями, разделенными слоем окисла. Этот гамильтониан, строго говоря, справедлив только в низшем приближении по прозрачности. Однако в нашем случае можно попробовать рассматривать его в качестве упрощенного модельного подхода, описывающего примесное рассеяние взаимодействующих фермионов при любой величине V_{imp} . При таком подходе V_{imp} — это просто феноменологический параметр, описывающий фермион-примесное рассеяние. В окончательных ответах он должен быть выражен через наблюдаемые в эксперименте величины.

Любой модельный гамильтониан, описывающий рассеяние фермионов на примеси, должен сохранять электрический заряд и, в случае точечной примеси ($V_{imp}(x, y) = V_{imp}\delta(x)\delta(x-y)$), приводить к существованию δ -функционального источника кирального заряда. (Нам будет удобно измерять заряд фермиона в единицах заряда свободного фермиона e_0 , тогда полный заряд есть $\hat{\rho}(x, t) = \hat{\rho}(x, t)_R + \hat{\rho}(x, t)_L$, а киральный заряд, если определить его как $+1$ для R-фермионов и -1 для L, будет совпадать с выражением для электрического тока: $\hat{j}(x, t) = \hat{\rho}_R(x, t) - \hat{\rho}_L(x, t)$.) Гамильтониан КФ удовлетворяет этим минимальным требованиям. Действительно, прямое вычисление коммутатора $[\mathcal{H}_{imp}, \hat{j}(x, t)]_-$, входящего в уравнение Шредингера для гайзенберговских операторов, позволяет написать уравнение неразрывности для кирального заряда. Для этого достаточно заметить, что

$$\begin{aligned} [\hat{\rho}(x, t), \hat{\Psi}_{R,L}(y, t)]_- &= -\delta(x-y)\hat{\Psi}_{R,L}(y, t), \\ [\hat{\rho}(x, t), \hat{\Psi}_{R,L}^\dagger(y, t)]_- &= \delta(x-y)\hat{\Psi}_{R,L}^\dagger(y, t), \\ [\hat{j}(x, t), \hat{\Psi}_{R,L}(y, t)]_- &= \mp\delta(x-y)\hat{\Psi}_{R,L}(y, t), \\ [\hat{j}(x, t), \hat{\Psi}_{R,L}^\dagger(y, t)]_- &= \pm\delta(x-y)\hat{\Psi}_{R,L}^\dagger(y, t). \end{aligned}$$

Это позволяет вычислить $\partial_t \hat{j}(x, t)$:

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{imp}, \hat{j}(y, t)]_- = & \int dx V(x, y) [-\hat{\Psi}_R^\dagger(x, t)\hat{\Psi}_L(y, t) - \hat{\Psi}_R^\dagger(y, t)\hat{\Psi}_L(x, t) + \\ & + \hat{\Psi}_L^\dagger(x, t)\hat{\Psi}_R(y, t) + \hat{\Psi}_L^\dagger(y, t)\hat{\Psi}_R(x, t)]. \end{aligned}$$

Переходя к точечному взаимодействию и вводя псевдоскалярный оператор $\hat{s}(t)$ (бозонного типа), описывающий примесное рассеяние,

$$\hat{s}(t) = 2i(\hat{\Psi}_L^\dagger(0, t)\hat{\Psi}_R(0, t) - \hat{\Psi}_R^\dagger(0, t)\hat{\Psi}_L(0, t)), \quad (4)$$

$$\hat{s}(t)^\dagger = \hat{s}(t),$$

видим, что $-i[\mathcal{H}_{imp}, \hat{j}(x, t)] = V_{imp}\hat{s}(t)\delta(x)$. Отсюда следует уравнение неразрывности для кирального заряда:

$$\partial_t \hat{j}(t, x) + v_c^2 \partial_x \hat{\rho}(t, x) = V_{imp} \hat{s}(t) \delta(x) - \frac{1}{\pi} \partial_x U_{ext}(x, t), \quad (5)$$

При его выводе использовано выражение для так называемой адлеровской (аксиальной) аномалии [14, 15]. Для LL в кулоновской калибровке его можно записать в виде

$$\partial_t \hat{j}(x, t) + \partial_x \hat{\rho}(x, t) = -\frac{1}{\pi} \partial_x U(x, t), \quad (6)$$

где $U(x, t)$ — полное электрическое поле, состоящее из внешнего поля $U_{ext}(x, t)$, приложенного к каналу, и среднего поля фермионов в точке x :

$$-\partial_x U(x, t) = \int dy \rho(y, t) \partial_y V_{e-e}(x - y) + E_{ext}(x, t).$$

Адлеровская аномалия играет одну из центральных ролей в теории взаимодействующих одномерных фермионов. Дело в том, что гамильтониан e - e -взаимодействия LL без примеси сохраняет как киральный, так и электрический заряд. Если бы ни одна из симметрий $\Psi_{R,L} \rightarrow \exp(\pm i\Lambda)\Psi_{R,L}$ не была бы нарушена, то e - e -взаимодействие не проявлялось бы в электрических свойствах канала. (В этом случае мы бы имели два алгебраических уравнения, выражающие законы сохранения электрического и кирального зарядов, для двух величин $\langle \hat{\rho}(q, \omega) \rangle$ и $\langle \hat{j}(q, \omega) \rangle$, совпадающих с невзаимодействующей теорией.) Таким образом, для проявления взаимодействия в задачах, связанных с переносом заряда, одна из этих симметрий должна быть нарушена. Естественно, нарушается киральная симметрия, которая приводила бы к закону сохранения кирального заряда (см. правую часть выражения для адлеровской аномалии (6)), а электрический заряд сохраняется.

Однако при вычислении кондактанса мы всегда сталкиваемся с расходящимися в ультрафиолетовой области ответами. Физическая причина этой расходимости состоит в том, что справа и слева от точечной примеси (на микроскопическом масштабе $\sim 1/p_F$) образуется двойной слой (см. [11]). С точки

зрения одномерной теории, справедливой на больших масштабах, — это скачок заряда. В подходе со сшивкой в этом можно убедиться непосредственно. В работе [11] показывается, что требование калибровочной инвариантности одномерной теории, учитывающей существование прошедшей волны, позволяет однозначно вычислить его величину. После перенормировки, рецепт которой определяется калибровочной инвариантностью, и при выполнении условий (1) теория со сшивкой волновых функций уже не содержит ультрафиолетовых расходимостей, а кондактанс определяется только эффектами, связанными с инфракрасной областью. Если этот скачок заряда не экранируется трехмерным окружением, то его дальнотействующее взаимодействие с фермионами одномерного канала и приводит к аномальной частотной зависимости кондактанса. (Вопросы, связанные с экранировкой зарядов, рассмотрены в работе [16].)

Возвращаясь к туннельному гамильтониану, приходится констатировать, что переход к точечной примеси делает теорию патологичной. Дело в том, что с точки зрения «чистой математики» дифференциальные уравнения первого порядка с δ -функциональным потенциалом не имеют решения. Действительно, варьируя КФ-гамильтониан без учета e - e взаимодействия по $\Psi_R^*(x)$, мы бы получили уравнение

$$i\partial_x \Psi_R(x) = \int dy V_{imp} \delta(x - y) \delta(x) \Psi_L(x) - E \Psi_R(x).$$

Интегрируя это выражение по бесконечно малому интервалу, видим, что скачок волновой функции должен быть равен

$$i[\Psi_R(\epsilon) - \Psi_R(-\epsilon)] = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dy V_{imp} \Psi_L(y) \delta(y).$$

Но это равенство не может быть выполнено: его левая часть антисимметрична при $\epsilon \rightarrow -\epsilon$, а правая — симметрична. Таким образом, туннельный гамильтониан корректно (в математическом смысле) описывает рассеяние фермионов только на дальнотействующей примеси (тогда правая часть этого выражения будет равна нулю), но ответы этой задачи будут качественно отличаться от рассматриваемого нами случая точечной примеси. В результате такой, чисто математической, некорректности переход в линеаризованном гамильтониане к точечному примесному рассеянию приводит к появлению дополнительных (нефизических) ультрафиолетовых расходимостей. Подход со сшивкой нелинеаризованно-

го уравнения Шредингера, естественно, не содержит этой патологии. Таким образом, эти два подхода заведомо нетождественны — они различаются поведением в ультрафиолетовой области. Это надо иметь в виду при детальном сопоставлении результатов, полученных из этих двух подходов. Однако вычисления с нелокальным и содержащим бесконечное количество слагаемых гамильтонианом достаточно трудоемки. Вместе с этим, из физических соображений можно ожидать, что на очень больших расстояниях от примеси примесное рассеяние все-таки должно восприниматься как точечное. Это позволяет надеяться, что КФ-гамильтониан правильно описывает эффекты, определяемые инфракрасной областью. Так и происходит при выполнении условий (1)). В этом случае оба подхода приводят к одинаковым частотным зависимостям кондактанса. Однако даже в этом случае использование КФ-гамильтониана приводит к появлению слагаемых, расходящихся в ультрафиолетовой области и формально существующих даже в отсутствие взаимодействия. Причина их появления — указанная выше математическая некорректность, и поэтому они должны быть опущены.

Выражение (5) служит исходной точкой для тождеств Уорда. Мы будем вычислять фейнмановский линейный отклик системы на бесконечно малое внешнее поле $U_{ext}(1)$ ($1 = x_1, t_1$) и сведем его к вычислению поляризационного оператора (РО) поля $\hat{s}(1) = \delta(x_1)\hat{s}(t_1)$:

$$\Pi_{s,s}(1, 2) = \langle T\{\hat{s}(1), \hat{s}(2)\} \rangle = \delta(x_1)\delta(x_2)\mathcal{S}(t_1 - t_2).$$

Нам будут нужны все РО $\Pi_{\alpha,\beta}(\omega, x_1, x_2)$, где $\alpha, \beta = j, \rho, s$. Они немного отличаются от обычных выражений для матрицы линейных откликов. Держа в голове подход Хаббарда, в котором e - e -взаимодействие сводится к эволюции невзаимодействующих фермионов в медленно меняющемся внешнем поле (с последующим интегрированием по всем его реализациям) [17], видим, что при обычном определении матрицы линейных откликов поляризационные операторы с индексом ρ , входящие и в e - e взаимодействие, и в линейный отклик, будут различаться множителем i . Чтобы сделать вершины одинаковыми, выделим это i и в отклике:

$$j(\omega, x_1) = \int dx_2 \Pi_{j,\rho}(\omega, x_1, x_2)(-iU_{ext}(\omega, x_2)).$$

Это позволяет определить все РО одинаково: $\Pi_{\alpha,\beta}(1, 2) = \langle T\{\hat{\alpha}(1), \hat{\beta}(2)\} \rangle$. (Мы вычисляем фейнмановский отклик, поэтому здесь стоит $\{, \}$ — антикоммутатор.) Из-за законов сохранения различные

компоненты матрицы $\Pi_{\alpha,\beta}$ связаны между собой. Закон сохранения полного электрического заряда говорит, что $\partial_{t_1}\Pi_{j,\beta}(1, 2) = -\partial_{x_1}\Pi_{\rho,\beta}(1, 2)$. Кроме этого, компоненты матрицы $\Pi_{\alpha,\beta}$ связаны между собой еще и тождествами Уорда, следующими из (5). Для их получения домножим уравнение (5) на $\theta(t_1 - t_2)\rho(2)$ справа, потом на $\theta(t_2 - t_1)\rho(2)$ слева, сложим эти выражения и вычислим матричный элемент по основному состоянию. Получившееся выражение отличается на

$$\delta(t_1 - t_2)\langle [j(x_1), \rho(2)]_- \rangle = \frac{i}{\pi}\delta(t_1 - t_2)\partial_{x_1}\delta(x_1 - x_2)$$

от $\partial_{t_1}\Pi_{j,\rho}(1, 2)$. Отметим, что для получения правой части этого уравнения использовано выражение для швингеровской аномалии:

$$[\hat{\rho}_{R,L}(x, t), \hat{\rho}_{R,L}(x', t)]_- = \pm \frac{i}{2\pi}\partial_x\delta(x - x').$$

В итоге мы получили связь

$$\partial_{t_1}\Pi_{j,\rho}(1, 2) + v_c^2\partial_{x_1}\Pi_{\rho,\rho}(1, 2) = V_{imp}\Pi_{s,\rho}(1, 2) + \frac{i}{\pi}\delta(t_1 - t_2)\partial_{x_1}\delta(x_1 - x_2).$$

Учитывая, что

$$[\rho(x), \rho(x')]_- = [\rho(x), s(x')]_- = 0,$$

дифференцируем эту связь по времени. В результате имеем

$$\partial_{t_1}^2\Pi_{j,\rho}(1, 2) - v_c^2\partial_{x_1}^2\Pi_{j,\rho}(1, 2) = V_{imp}\partial_{x_2}\Pi_{s,j}(1, 2) + \frac{i}{\pi}\partial_{t_1}\delta(t_1 - t_2)\partial_{x_1}\delta(x_1 - x_2). \quad (7)$$

Вычислим теперь $\Pi_{s,j}(1, 2)$. Для получения этого поляризационного оператора нам нужен коммутатор

$$\begin{aligned} \langle [j(x_1), s(x_2)]_- \rangle|_{t_1=t_2} &= \\ &= -2i\delta(x_1 - x_2)\langle (\hat{\Psi}_L^\dagger(x_1, t)\hat{\Psi}_R(x_1, t) + \\ &\quad + \hat{\Psi}_R^\dagger(x_1, t)\hat{\Psi}_L(s_1, t)) \rangle. \end{aligned}$$

Матричный элемент (аномальное среднее), стоящий в правой части, может быть отличным от нуля только в том случае, когда основное состояние вырождено по киральности, т.е. тогда, когда основное состояние есть суперпозиция волновых функций с разной киральностью. Для притягивающихся фермионов такого вырождения не может быть, так как в этом случае критическая температура перехода в сверхпроводящую фазу типа Костерлица–Таулеса

$T_c \sim v_c/L \ll T_d \sim 1/L$ — температура вырождения [18], а для отталкивания аномальное среднее равно нулю при $T \ll T_d \ll T_c$ [19]. Здесь L — это длина канала; в этих неравенствах она считается конечной. Необходимость учета температуры вырождения и возможность существования фаз типа Костерлица–Таулеса в конечной одномерной системе подробно обсуждена во Введении статьи [18].

Действуя как в предыдущем случае, имеем

$$\partial_{t_2}^2 \Pi_{s,j}(1, 2) - v_c^2 \partial_{x_2}^2 \Pi_{s,j}(1, 2) = V_{imp} \partial_{t_2} \Pi_{s,s}(1, 2). \quad (8)$$

В итоге получим

$$\begin{aligned} \Pi_{j,\rho}(\omega, k, q) = & -2\pi\delta(q-k) \frac{i}{\pi} \frac{\omega k}{\omega^2 - v_c^2 k^2} - \\ & - \frac{\omega q V_{imp}^2 \Pi_{s,s}(\omega)}{(\omega^2 - v_c^2 k^2)(\omega^2 - v_c^2 q^2)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Первое слагаемое — это баллистический ток (в пределе $\omega \rightarrow 0$ оно дает выражение для кондактанса баллистического канала, равное $e_0^2/2\pi v_c$), а второе — вклад от рассеяния. Однако мы еще не учли вклад от решения однородного уравнения

$$\begin{aligned} \Pi_{j,\rho}^0(\omega, k, q) = \\ = f(k) 2\pi\delta(q-k) [\delta(\omega - v_c k) + \delta(\omega + v_c k)]. \end{aligned}$$

При переходе в статику оно дает точно такой же вклад, как и баллистика, при $f(k) \propto k$. (Постоянную же в случае притяжения и отталкивания можно брать разной.) Это означает, что данный подход реально позволяет вычислить только зависящую от частоты часть коэффициента отражения $(\delta|\mathcal{R}_\omega|^2)$. В случае существования ультрафиолетовых расходимостей (неинтегрируемые особенности при $t \rightarrow 0$ в корреляторе $\Pi_{s,s}(t)$) они тоже дадут вклад в $|\mathcal{R}_\omega|^2$ при $\omega = 0$.

Обсудим теперь важный для нашей задачи вопрос о переходе от фейнмановского отклика к запаздывающему. Дело в том, что исходно равновесные диаграммные техники (и фейнмановская, и маппу-баровская) вычисляют фейнмановские отклики. А дальше возможны два пути:

- можно довести до конца вычисление фейнмановского отклика, и только в окончательном ответе для $j(\omega, k)$ совершить переход от фейнмановского отклика к запаздывающему,
- а можно делать аналитическое продолжение «символического» выражения для отклика, записанного в терминах функций Грина, до его

настоящего вычисления. В этом случае часто продолжают не окончательное выражение для наблюдаемой величины, а каждый член произведения по отдельности (в нашей задаче часто продолжают статсумму, выражение которой не убывает на больших частотах; см., например, Приложение в [4]).

Когда все функции Грина, входящие в аналитическое выражение для отклика, убывают при $\omega \rightarrow \infty$, оба подхода приводят к одному ответу. Проблема возникает в том случае, когда это условие не выполняется, а продолжают «по обычным правилам» блок, не убывающий (а в нашей задаче даже растущий) на больших частотах. В этом случае эти два способа вычислений приведут к разным ответам. (Поэтому до доказательства того, что запаздывающая функция Грина есть просто аналитическое продолжение фейнмановской в верхнюю полуплоскость, всегда доказывалось убывание фейнмановской функции Грина при $\omega \rightarrow \infty$).

Обсудим последнее утверждение подробнее. В Приложении А показано, что для вычисления эффективного коэффициента отражения, входящего в кандактанс, нужно вычислить коррелятор $\mathcal{S}$ и разделить его на частоту. Если бы фейнмановский коррелятор $\mathcal{S}_F(\omega) - \mathcal{S}_F(\omega = 0)$ убывал в области больших частот, то запаздывающий коррелятор можно было бы получить как аналитическое продолжение фейнмановского с вещественной оси в верхнюю полуплоскость комплексной переменной ω . (Предполагается, что все особенности в фейнмановском корреляторе сдвинуты с вещественной оси по правилу $\omega \rightarrow \omega + i\delta \text{sgn}(\omega)$, следующему из фейнмановских граничных условий.) И, что самое важное в этой задаче, при вычислении низкочастотного запаздывающего отклика можно было бы использовать длинноволновую асимптотику коррелятора $\mathcal{S}_F(t)$. (В интересующей нас задаче вычисления обычно проводятся в t -представлении и только потом в фурье-представлении.)

Действительно, убывающий по частоте фейнмановский коррелятор всегда можно разделить на две функции, каждая из которых не имеет особенностей во всей верхней (нижней) полуплоскости $\mathcal{S}_F^\pm(\omega)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_F(\omega) = \mathcal{S}_F^+(\omega) + \mathcal{S}_F^-(\omega) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{\mathcal{S}_F^+(\omega')}{\omega' - \omega - i\delta} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{\mathcal{S}_F^-(\omega')}{\omega' - \omega + i\delta}. \end{aligned} \quad (10)$$

После фурье-преобразования этого выражения по ω получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_F(t) = & \theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \exp(-i\omega't) \mathcal{S}_F^+(\omega') + \\ & + \theta(-t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \exp(-i\omega't) \mathcal{S}_F^-(\omega'). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что ветвь, не имеющая особенностей в верхней полуплоскости, действительно определяет запаздывающую функцию Грина $\mathcal{S}_{ret}(t)$, вычисленную «по обычному» рецепту, а поскольку большие частоты не дают вклада в это выражение, то при вычислении низкочастотного запаздывающего отклика можно было бы использовать длинноволновую асимптотику коррелятора в t -представлении. Но так можно действовать только в том случае, когда фейнмановский коррелятор убывает при больших частотах.

Переходим к нашей задаче. Подумаем, что мы знаем о корреляторе $\mathcal{S}_F(\omega)$. Прежде всего, его точное выражение, справедливое для всех частот, обязано оставаться растущим как $|\omega|$ при $|\omega| \rightarrow \infty$. Следовательно, $\mathcal{S}_F(\omega)$ имеет полюс первого порядка в бесконечно удаленной точке ω_∞ (что бы ни происходило в ультрафиолетовой области, физическое требование к способу перенормировки должно содержать условие $\mathcal{S}_F(\omega) \propto |\omega|$ при $|\omega| \rightarrow \infty$). Это следует из того, что при больших частотах эффекты, связанные с e - e -взаимодействием, должны быть подавлены, т.е. коэффициент отражения фермионов от примеси должен стремиться к постоянному значению. (Высокочастотные эффекты в упорядоченной и нормальной фазах всегда совпадают.)

Кроме того, его длинноволновая асимптотика (а только ее мы и можем вычислить) растет еще сильнее: растущей оказывается даже величина $(\mathcal{S}_F(\omega) - \mathcal{S}_F(0))/\omega$. И этот рост продолжается вплоть до частот $\omega \sim M$. При больших частотах аналитические вычисления в нашем случае невозможны, так как требуют знания гамильтониана в ультрафиолетовой области. В этой области частот в выражениях для откликов должен произойти переход от сильного к слабому межэлектронному взаимодействию. Из всего этого следует, что в выражении (10) мы должны интегрировать по замкнутым контурам $C_R^\pm$, идущим сначала по вещественной оси, а потом замыкающимся в верхнюю (нижнюю) полуплоскость (теорема Коши), таких, чтобы в области, ограниченной этими контурами, у функции $\mathcal{S}_F^+(\omega')$ не было бы особенностей (на

самом деле мы вынуждены ограничить размер контура условием $|\omega|/M \leq 1$). Таким образом, функции $\mathcal{S}_F^+(\omega)$, аналитической во всей верхней полуплоскости, в нашем случае просто нет. Есть лишь функции, аналитические внутри $C_R^\pm$:

$$\mathcal{S}_F(\omega) = \int_{C_R^+} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{\mathcal{S}_F^+(\omega')}{\omega' - \omega - i\delta} - \int_{C_R^-} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{\mathcal{S}_F^-(\omega')}{\omega' - \omega + i\delta}, \quad (11)$$

после фурье-преобразования этого выражения получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_F(t) = & \theta(t) \int_{C_R^+} \frac{d\omega'}{2\pi} \exp(-i\omega't) \mathcal{S}_F^+(\omega') + \\ & + \theta(-t) \int_{C_R^-} \frac{d\omega'}{2\pi} \exp(-i\omega't) \mathcal{S}_F^-(\omega'). \end{aligned}$$

Из-за того, что $\mathcal{S}_F^+(\omega')$ растет в области больших частот, интеграл по отрезку контура R^+ не мал, и его вкладом в запаздывающую функцию Грина нельзя пренебречь (а само существование такого вклада всегда означает существование особенности в $\mathcal{S}_F^+(\omega)$ при больших частотах в верхней полуплоскости). Таким образом, для продолжения этой функции Грина в область, ограниченную контуром C_R^+ , надо знать поведение коррелятора $\mathcal{S}_F^+(\omega)$ в ультрафиолетовой области, что в принципе невозможно. Поэтому в нашей задаче надо продолжать окончательное выражение для фейнмановского отклика, следующее из выражения (9), и сформулировать теорию так, чтобы в отклик давала бы вклад только область малых частот.

Отсюда следует и то, что при переходе от мацубаровского отклика (в τ -представлении) к запаздывающему нельзя ограничиться заменой $\tau \rightarrow i(t \pm i\delta)$ в выражении для статсуммы, вычисленной при больших τ , если она имеет неинтегрируемую особенность при $t \rightarrow 0$. Такой способ вычислений тоже игнорирует вклад от особенности в ультрафиолетовой области [4].

Вклад рассеяния в фейнмановский отклик принципиально отличается от выражения для $\mathcal{S}_F(\omega)$, так как он сильнее убывает по $|\omega|$:

$$\delta j_F(\omega, k) = \frac{\omega V_{imp}^2 \mathcal{S}_F(\omega)}{v_c^2 k^2 - \omega^2 - i\delta} \int (dq) \frac{E_{ext}(q, \omega)}{v_c^2 q^2 - \omega^2 - i\delta}, \quad (12)$$

поэтому вопрос об интеграле по контуру R^+ в $\delta j_F(\omega, k)$ просто не стоит. Это выражение точное и, на самом деле, справедливое не только в слу-

чае КФ-гамильтониана, но оно содержит неизвестную функцию $\mathcal{S}_F(\omega)$, которую надо вычислить (как и все это выражение) по фейнмановским правилам и связать с наблюдаемой величиной. Функция $\mathcal{S}_F(\omega)$, в отличие от полюсных слагаемых, медленно зависит от частоты, так как это петлевая диграмма и все особенности входящих в нее свободных пропагаторов «замываются» интегрированием. После аналитического продолжения выражения (12) с вещественной оси в верхнюю полуплоскость (см. Приложение А) в выражении для запаздывающего отклика (δj_{ret}) можно переходить к пределу $\omega \rightarrow 0$. Если нас интересует отклик на медленно меняющееся поле, то необходимо учесть, что $\mathcal{S}_F(\omega) - \mathcal{S}_F(0) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$. Компенсировать это убывание можно за счет полюсного вклада подынтегрального выражения. Поэтому наиболее медленно убывающая асимптотика кондактанса определяется δ -функционным вкладом в (12). В итоге для вычисления кондактанса нам оказывается достаточно знать асимптотику $\mathcal{S}_F(\omega)$ при малых частотах, но вычислена она должна быть по фейнмановским правилам при вещественных частотах.

Связать $\mathcal{S}(\omega)$ с перенормированным за счет взаимодействия коэффициентом отражения фермионов от примеси можно, рассмотрев невзаимодействующую теорию. В этом пределе прямое вычисление отклика и сравнение его с (12) дает $\mathcal{S}_F(\omega)/|\omega| \propto -|R_0|^2$. Естественно ожидать, что и в случае взаимодействующих носителей это отношение можно связать с $|\mathcal{R}_\omega|^2$. Это подтверждается выражением для кондактанса, следующим из (12) (Приложение А). В нем показано, что в кондактанс входит величина

$$|\mathcal{R}_\omega|^2 = -\frac{\pi}{2v_c|\omega|} V_{imp}^2 \operatorname{Re} \mathcal{S}(|\omega|). \quad (13)$$

Она аналитична в верхней полуплоскости в области C_R^+ , определяемой условием $|\omega|/\mathcal{M} \ll 1$, если под $|\omega|$ понимать $+\sqrt{(\omega + i\delta)^2}$, а кондактанс выражается через нее по обычной формуле:

$$\mathcal{G}(\omega) = \frac{1}{2\pi v_c} (1 - |\mathcal{R}_\omega|^2). \quad (14)$$

3. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ПРИ $v_c = 1/2$

3.1. Переход к квазичастичному представлению

Хорошо известно, что в одномерном случае пакеты, состоящие из фермионов с линейным спектром, не расплываются. Это означает, что состояние

с одной и той же энергией может быть представлено в виде большого числа различных пакетов, состоящих из разного числа частиц. Единственно, что может различать такие пакеты, — это коммутационные свойства. Волновые функции пакетов, состоящие из четного числа фермионов, коммутируют, а из нечетного — антикоммутируют. Это означает, что любое состояние может быть описано как в фермионном, так и в бозонном представлении, причем многими способами. (В таких случаях принято говорить о вырождении состояний.) В частности, любой фермион,двигающийся вправо/влево ($\pm$), может быть представлен как пакет бозонов $\hat{O}(x)_\pm$:

$$\hat{\Psi}_\pm^\dagger(x) = \exp\left(\hat{A}_\pm^\dagger(x)\right) \frac{\hat{\sigma}_\pm^\dagger}{\sqrt{L}} \exp\left(-\hat{A}_\pm(x)\right), \quad (15)$$

$$\hat{A}_\pm^\dagger(x) = \frac{1}{L} \sum_{n>0} e^{\mp i p_n x} \sqrt{\frac{2\pi}{p_n}} \hat{O}_\pm^\dagger(x)(p).$$

Здесь $p_n = 2\pi n/L$, а $\hat{\sigma}_\pm$ — аналог лестничных операторов Халдейна [20], определяемых условиями $\hat{\sigma}_\pm^\dagger \hat{\sigma}_\pm = 1$, $\{\hat{\sigma}_\pm, \hat{\sigma}_\mp\} = 0$ и коммутирующих со всеми бозонами. Это соотношение представляет из себя просто алгебраическое тождество. Для его доказательства достаточно заметить, что так определенные поля $\hat{\Psi}_\pm^\dagger(x)$ и $\hat{\Psi}_\pm(y)$ обычным образом антикоммутируют при $|x - y|/L \ll 1$. (Антикоммутация обеспечивается операторами σ со специально подобранными коммутационными свойствами; важен также и численный коэффициент $\sqrt{2\pi/p_n}$ в показателе экспоненты.) Отметим, что вырождение состояний не снимается точечным e - e -взаимодействием, так как спектр взаимодействующих фермионов в этом случае остается линейным.

Для того чтобы представить в бозонном представлении фермионы R и L , в выражение (15) вместо $\hat{O}_\pm^\dagger(x)$ нужно подставить операторы

$$\hat{C}_{R,L}(p) = \sqrt{\frac{2\pi}{p}} \int dx e^{\mp i p x} \hat{q}_{R,L}(x), \quad p > 0. \quad (16)$$

В нашей задаче удобно использовать другое представление — представление нормальных возбуждений латтинжеровской жидкости ($\hat{\chi}_\pm(x)$) [21]. Это представление сводит гамильтониан с e - e -взаимодействием без примеси к свободному. Можно показать, что основное состояние латтинжеровской жидкости без примеси является «вакуумным состоянием» полей $\hat{\chi}_\pm(x)$. Из-за поляризации основного состояния их заряд (e^*) отличен от заряда e_0 и равен $1/\sqrt{v_c}$. Таким образом, кондактанс канала без примеси может быть вычислен по обычной формуле, справедливой для невзаимодействующих

фермионов: $e^*/2\pi$. Поля χ представляют собой не что иное, как правый/левый фермион,двигающийся вместе с поляризационным облаком, возникающим в основном состоянии. Поэтому он не квантуется в единицах заряда свободного фермиона.

Для перехода к представлению нормальных возбуждений в работе [21] в выражении (15) вместо поля $\hat{O}(x)_\pm$ использовались поля $\hat{C}(\pm p)$, диагонализующие гамильтониан с точечным e - e -взаимодействием

$$\begin{aligned} H_{ee} &= \frac{v_c}{L} \sum_{n>0} p_n (\hat{C}_p^\dagger \hat{C}_p + \hat{C}_{-p}^\dagger \hat{C}_{-p}) = \\ &= \frac{v_c}{L} \sum_{i=1,2; n>0} p_n \hat{B}_i^\dagger(p) \hat{B}_i(p), \\ \hat{B}_{1,2}(p) &= \frac{\hat{C}(p) \pm \hat{C}(-p)}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

$C(p)|\rangle = 0$, и выражающиеся через бозоны (16) с помощью преобразования

$$\begin{aligned} \hat{C}(p) &= \text{ch } \theta \hat{C}_R(p) + \text{sh } \theta \hat{C}_L^\dagger(p), \\ \hat{C}^\dagger(-p) &= \text{ch } \theta \hat{C}_L^\dagger(p) + \text{sh } \theta \hat{C}_R(p) \end{aligned} \quad (17)$$

(«угол поворота» θ определяется равенством $\text{sh}(2\theta) = V_0/2\pi v_c$). В задаче с точечной примесью нам будет удобно ввести операторы квазичастичных возбуждений $\hat{\chi}_{1,2}$ немного по-другому: с помощью бозонов $\hat{B}_{1,2}(p)$. В этом случае гамильтониан e - e -взаимодействия без примеси тоже сводится к свободному:

$$H_{ee} = v_c \int dx \left(\hat{\chi}_1^\dagger(x) (-i\partial_x) \hat{\chi}_1(x) + \hat{\chi}_2^\dagger(x) (i\partial_x) \hat{\chi}_2(x) \right). \quad (18)$$

Для того чтобы выразить примесную часть гамильтониана через поля $\hat{\chi}_{1,2}$, нужно переписать показатель экспоненты произведения $\Psi_R(0)\Psi_L^\dagger(0)$ с помощью формул (15), (17) через бозоны $\hat{C}(\pm p)$:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_R^\dagger(0)\hat{\Psi}_L(0) &= \frac{\Delta^{1-1/v_c}}{L} \exp(\hat{A}^\dagger) \frac{\sigma_R^{\dagger\sigma_L}}{L} \exp(-\hat{A}), \\ \hat{A}^\dagger &= \frac{1}{L} \sum_{n>0} \sqrt{\frac{2\pi}{p_n}} \frac{2}{v_c} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{C}^\dagger(p_n) - \hat{C}^\dagger(-p_n)), \end{aligned} \quad (19)$$

где $\Delta = \mathcal{M}_b L e^{\gamma_E}/2\pi$ (ультрафиолетовое обрезание $1/\mathcal{M}_b$ возникло из-за того, что на масштабе порядка размера примеси e - e -взаимодействие трехмерно, что делает одномерную формулу (19), полученную с помощью выражения (15) и содержащую произведение двух фермиевских операторов в одной точке, неприменимой в ультрафиолетовой области). Выражение (19) показывает, что в точках $2/v_c = m_1^2$ (m_1

— целое число) гамильтониан Кейна–Фишера сводится к задаче о рождении/уничтожении m_1 фермионных квазичастиц в точке $x = 0$. (Показатель экспоненты в этом случае совпадает с показателем произведения $\chi_2^{m_1}$.) Это был бы нуль из-за принципа Паули, но при написании произведения $\chi_2^{m_1}$ надо учесть правильный порядок экспонент с $\hat{A}^\dagger$ и $\hat{A}$, взятых в одной точке (а этот множитель расходится, если координаты фермионов совпадают.) Таким образом, во всех случаях, кроме $v_c = 2$, мы будем иметь неопределенность типа $0 \cdot \infty$. При $m_1 = 2$ ($v_c = 1/2$) в гамильтониане возникает слагаемое, описывающее рождение/уничтожение двух квазичастиц в одной точке. Эта неопределенность раскрывается с помощью разложения $\hat{\chi}_2(x)$ в ряд Тейлора с симметричной раздвижкой аргументов сомножителей. Кроме того, из (19) мы видим, что возбуждения $\hat{\chi}_1$ (пакет, определяющийся полем B_1) не рассеиваются на точечной примеси, и вся примесная часть гамильтониана при $v_c = 1/2$ равна [13]

$$\mathcal{H}_{imp} = i\gamma(\hat{\chi}_2^\dagger(0)\partial_x\hat{\chi}_2^\dagger(0) - \partial_x\hat{\chi}_2(0)\hat{\chi}_2(0)), \quad (20)$$

где $\gamma = 2V_{imp} \exp(-\gamma_E)/\mathcal{M}_b$ — константа взаимодействия, имеющая размерность длины, а под сокращенной записью $\partial_x\chi_2(0)$ надо понимать предел $\partial_x\chi_2(x)|_{x \rightarrow 0}$. После перехода к майорановскому представлению

$$\hat{\chi}_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{B}(x) + i\hat{\Phi}(x)), \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \{\hat{B}(x), \hat{B}(x')\} &= \{\hat{\Phi}(x), \hat{\Phi}(x')\} = \delta(x - x'), \\ \{\hat{\Phi}(x), \hat{B}(x')\} &= 0, \end{aligned}$$

этот гамильтониан диагонализуетсся с помощью унитарного поворота, так как сводится к квадратичной форме двух не взаимодействующих друг с другом вещественных полей:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{tot} &= \frac{v_c}{2L} \sum_n [\mathbb{B}(-p_n)p_n\mathbb{B}(p_n) + \Phi(-p_n)p_n\Phi(p_n)] + \\ &+ \gamma \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} \Phi(p_m) \frac{1}{L} \sum_n p_n \Phi(p_n) - \\ &- \gamma \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} \mathbb{B}(p_m) \frac{1}{L} \sum_{n \neq 0} p_n \mathbb{B}(p_n). \end{aligned} \quad (22)$$

Важное для дальнейшего условие $m \neq 0$ следует из того, что это состояние изначально отсутствовало в формулах бозонизации.

Нам осталось выразить оператор $\hat{s}$ при $v_c = 1/2$ через майорановские поля $\mathbb{B}; \Phi$. Мы определяли

$\hat{s}(x, t)$ как киральный поток, входящий в уравнение неразрывности для кирального заряда (см. уравнение (5)). Он отличается от выражения, стоящего в гамильтониане, относительным знаком первого и второго слагаемых (физический смысл оператора $\hat{s}(x, t)$ — оператор кирального заряда, уходящего в конденсат). В итоге, повторяя все предыдущие вычисления, получаем

$$\begin{aligned}\hat{s}(0) &= 2\gamma_s \left(\hat{\chi}_2^\dagger(0) \partial_x \hat{\chi}_2^\dagger(0) + \partial_x \hat{\chi}_2(0) \hat{\chi}_2(0) \right) = \\ &= 2\gamma_s (\Phi(0) \partial_x \beta(0) + \beta(0) \partial_x \Phi(0)),\end{aligned}\quad (23)$$

где $\gamma = 2V_{imp}\gamma_s$.

3.2. Диагонализация гамильтониана

Поля, в терминах которых гамильтониан (22) диагонален $(\lambda; \beta)$, в гайзенберговском представлении имеют вид

$$\hat{\lambda}(\epsilon_n, t) = \hat{\lambda}(\epsilon_n) \exp\{i(\epsilon_n t)\},$$

где ϵ_n — спектр свободных майоранов. Они получают из «неповернутых» полей $(\Phi(m), \beta(n))$ преобразованием

$$\hat{\lambda}(\epsilon_n) = \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) \hat{\Phi}(m). \quad (24)$$

Далее обозначение ϵ_n будет показывать, что индекс n относится к «повернутым» полям, а p_m — к «неповернутым». Все суммирования ограничены сверху числом уровней N_1 : $|m| < N_1 = 2\pi LW/v_c$, где W — ширина зоны проводимости. Кроме того, необходимо учесть вещественность майорановских полей. Это означает, что в импульсном представлении при нормировке на длину канала их антикоммутатор равен

$$\{\hat{\lambda}(\epsilon_n), \hat{\lambda}(\epsilon_m)\} = L\delta_{n, -m}. \quad (25)$$

В Приложении В показано, что матрица поворота удовлетворяет «уравнению Шредингера»,

$$\begin{aligned}(\epsilon_n - v_c k_m) S(\epsilon_n, k_m) &= \gamma k_m \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} S(\epsilon_n, p_{m_1}) + \\ &+ \gamma \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} p_{m_1} S(\epsilon_n, p_{m_1}),\end{aligned}\quad (26)$$

а обратная матрица получается из нее одновременной сменой знаков индексов:

$$S^{-1}(\epsilon_n, p_n) = S(\epsilon_{-n}, p_{-n}). \quad (27)$$

Переходим к решению уравнения (26). Перепишем это уравнение отдельно для четной и нечетной по k_m частям функции $S(\epsilon_n, k_m)$. Для этого введем

$$S(\epsilon_n, k_m) = \frac{\mathcal{Z}(\epsilon_n) + k_m Y(\epsilon_n)}{(\epsilon_n - v_c k_m)}. \quad (28)$$

Отбирая четную и нечетную по k_m части функции в левой стороне равенства, имеем вместо исходного уравнения систему

$$\mathcal{Z}(\epsilon_n) = \frac{\gamma}{v_c} \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0; |m| < N_1} \frac{m[\mathcal{Z}(\epsilon_n) + (2\pi m/L)Y(\epsilon_n)]}{y_n - m}, \quad (29)$$

$$Y(\epsilon_n) = \frac{\gamma}{v_c} \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0; |m| < N_1} \frac{\mathcal{Z}(\epsilon_n) + (2\pi m/L)Y(\epsilon_n)}{y_n - m}, \quad (30)$$

где $y_n = \epsilon_n L / 2\pi v_c$ — безразмерная энергия. Из этого выражения видно, что коэффициенты при неизвестных функциях $\mathcal{Z}(\epsilon_n)$ и $Y(\epsilon_n)$ расходятся в термодинамическом пределе $N_1 \rightarrow \infty$. Наиболее сильная расходимость — линейная. Поэтому суммы должны вычисляться в конечных пределах $|m| \leq N_1$. Решение этой системы зависит от одного параметра $\flat$. (И способа регуляризации, который должен быть единым в ходе вычислений. Мы при выводе гамильтониана уже использовали симметричную раздвижку аргументов, поэтому пределы суммирования тоже выбраны симметричными.) Параметр

$$\flat = \frac{Lv_c}{\gamma N_1} \sim \frac{\mathcal{M}_b v_c^2}{W V_{imp}}$$

не зависит от длины канала. В случае точечной примеси $\mathcal{M}_b \sim 1/p_F$, т.е. $\mathcal{M}_b \sim W$.

В Приложении В.1 показано, что точное условие существования решения этой системы, определяющее спектр квазичастиц, есть

$$B(y_n) = \frac{\flat^2 N_1}{2(\flat + 1)}; \quad (31)$$

при $n, N_1 \gg 1$ оно переходит в более простое выражение

$$y_n = n \left(1 + \frac{1}{\pi n} \arcsin \frac{\pi n}{\sqrt{\mathcal{P}^2 + \pi^2 n^2}} \right) \sim n + n/\mathcal{P} \quad (32)$$

(в этом выражении $\arcsin$ определен на интервале $(-\pi, \pi)$, а $\mathcal{P} \sim N_1$; точное выражение для $\mathcal{P}$ — в Приложении В.1, формула (60)). В итоге вся матрица поворота может быть представлена в виде

$$S(\epsilon_n, k_m) = \frac{Lz_0}{[\tilde{N}_1^2 + y_n^2]^{1/2}} \frac{y_n}{y_n - m} \left[1 + \frac{\flat + 2}{\flat} \frac{m}{y_n} \right], \quad (33)$$

где

$$z_0 = b/2\pi(b+1),$$

$$\tilde{N}_1 = N_1(b+2)^2/2\pi(b+1).$$

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ОТРАЖЕНИЯ

4.1. Одночастичные функции Грина

Для вычисления коэффициента отражения фермионов от примеси нам будет нужна одночастичная фейнмановская функция Грина полей Φ ($G(\Phi|t) = \langle \Phi(t, x=0)\Phi(0,0) \rangle$) и функции Грина, в которых одно (или два) поля заменены на их производную, вычисленную в точке $x=0$. Они могут быть вычислены, так как для полей, диагонализующих гамильтониан, переход от шредингеровского представления к гайзенберговскому сводится к умножению на $\exp(i\epsilon_n t)$. (Эти поля возникли из L-фермионов, в которых импульс n отсчитывается в обратную сторону, таким образом, чтобы увеличение $|n|$ увеличивало энергию ϵ_n .) Поэтому

$$\Phi(x=0, t) = \frac{1}{L^2} \sum_{-N_1; m, n \neq 0}^{N_1} S(\epsilon_{-n}, p_{-m}) \exp(i\epsilon_n t) \lambda_n \quad (34)$$

и вся функция Грина полей Φ может быть представлена в виде

$$G(\Phi|t, 0) = \frac{1}{L^2} \sum_{-N_1; n, n' \neq 0}^{N_1} G_0(\lambda|n, t; n', 0) \times$$

$$\times \frac{1}{L^2} \sum_{-N_1; m, m' \neq 0}^{N_1} S(\epsilon_{-n}, p_{-m}) S(\epsilon_{-n'}, p_{-m'}),$$

где $G_0(\lambda|n, t; n', 0)$ — свободная функция Грина левого майорана λ , равная

$$G_0(\lambda|n, t; n', 0) =$$

$$= L \delta_{n, -n'} \exp\{i\epsilon_n t\} [\theta(t)\theta(-n) - \theta(-t)\theta(n)].$$

По индексам m и m' , стоящим в последней сумме, можно провести суммирование (см. выражение (33)); коэффициенты $\mathcal{A}(n)$ и $B(n)$, возникшие в результате этого суммирования, введены в Приложении В.1. Используя точное условие существования решения (31) и соотношение между этими коэффициентами ($B(y, N_1) = y\mathcal{A}(y, N_1) - 2N_1$), видим, что вся функция Грина оказывается пропорциональной

$$\sum_{-N_1; m \neq 0}^{N_1} \frac{y_n + ((b+2)/b)m}{y_n - m} = N_1(b+2). \quad (35)$$

После этого получаем окончательное выражение для функции Грина

$$G(\Phi|t, 0) =$$

$$= \Phi_0^2 \frac{1}{L} \sum_{-N_1; n \neq 0}^{N_1} \frac{\exp(i\epsilon_n t)}{1 + (n/\tilde{N}_1)^2} [\theta(t)\theta(-n) - \theta(-t)\theta(n)], \quad (36)$$

где $\Phi_0 = b/(b+2)$.

Кроме этой функции Грина нам будут нужны функции Грина с производными полей, вычисленными в точке $x=0$. Теперь для суммирования по немому индексу m (импульсу поля $\Phi(p_m, t)$) нам будет нужна сумма

$$\sum_{-N_1; m \neq 0}^{N_1} m \frac{y_n + ((b+2)/b)m}{y_n - m} =$$

$$= y_n B(y_n) + \frac{b+2}{b} C(y_n) = N_1 y_n b$$

(мы опять воспользовались выражением для точного спектра (31) и соотношением $C(y_n) = y_n B(y_n)$). В итоге

$$G_1(\Phi|t, 0) = \langle \partial\Phi(t, x=0)\Phi(t, x=0) \rangle =$$

$$= -i\Phi_0^3 \frac{2\pi}{L^2} \sum_{-N_1; n \neq 0}^{N_1} \frac{n \exp(i\epsilon_n t)}{1 + (n/\tilde{N}_1)^2} \times$$

$$\times [\theta(t)\theta(-n) - \theta(-t)\theta(n)]. \quad (37)$$

Выражение $\langle \Phi(t, x=0)\partial\Phi(t, x=0) \rangle$ отличается от $\langle \partial\Phi(t, x=0)\Phi(t, x=0) \rangle$ знаком, так как дифференцирование по координате приведет в этом случае к появлению множителя $n' = -n$.

Точно так же функция Грина с двумя производными равна

$$G_2(\Phi|t, 0) = \langle \partial\Phi(t, x=0)\partial\Phi(t, x=0) \rangle =$$

$$= -\Phi_0^4 \frac{(2\pi)^2}{L^3} \sum_{-N_1; n \neq 0}^{N_1} \frac{-n^2 \exp(i\epsilon_n t)}{1 + (n/\tilde{N}_1)^2} \times$$

$$\times [\theta(t)\theta(-n) - \theta(-t)\theta(n)]. \quad (38)$$

Таким образом, квантовые числа «неповернутых» полей оказались полностью изгнанными из выражений для одночастичных функций Грина.

Обратим внимание на появление лишних степеней Φ_0 , отличающих функции Грина полей Φ от ответов для плоской волны: в случае точечной примеси функции Грина с производными определяются

только соответствующим членом тейлоровского разложения поля $\Phi(x, t)$ в точке $x = 0$. Это существенно упрощает задачу, позволяя воспользоваться соотношением (31), и является следствием δ -функциональности примесного рассеяния.

4.2. Схема перенормировки и регуляризация

Для того чтобы вычислить перенормированный взаимодействием коэффициент отражения, нам надо вычислить коррелятор $\mathcal{S}(t)$:

$$\mathcal{S}(t) = \langle T \{ \hat{s}(t), \hat{s}(0) \} \rangle.$$

Согласно формуле (23) каждая вершина $\hat{s}(t)$ записывается в виде

$$\hat{s}(t) = 2\gamma_s (\Phi(t) \partial_x \beta(t) + \beta(t) \partial_x \Phi(t)).$$

Таким образом, коррелятор $\mathcal{S}(t)$ содержит четыре графика. Каждая из этих четырех функций Грина — это петлевая диаграмма, изображенная на рис. 1. По теореме Вика коррелятор равен

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(t) = & -(2\gamma_s)^2 \left(\langle \Phi(t, 0) \Phi(0, 0) \rangle \langle \partial_x \beta(t, 0) \partial_x \beta(0, 0) \rangle + \right. \\ & + \langle \beta(t, 0) \beta(0, 0) \rangle \langle \partial_x \Phi(t, 0) \partial_x \Phi(0, 0) \rangle - \\ & - \langle \beta(t, 0) \partial_x \beta(0, 0) \rangle \langle \partial_x \Phi(t, 0) \Phi(0, 0) \rangle - \\ & \left. - \langle \Phi(t, 0) \partial_x \Phi(0, 0) \rangle \langle \partial_x \beta(t, 0) \beta(0, 0) \rangle \right). \end{aligned} \quad (39)$$

В n -представлении первый график содержит множитель $(n_1 n'_1) \Phi_0^2(-b) \rightarrow (-n_1 n_1) \Phi_0^2(-b)$, второй — множитель $(nn') \Phi_0^2(b) \rightarrow (-nn) \Phi_0^2(b)$, а два последних дают $-2nn_1 \Phi_0(b) \Phi_0(-b)$. Таким образом, вся диаграмма приобретает множитель $-\Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) (n \Phi_0(b) - n_1 \Phi_0(-b))^2$. Здесь n — импульс функции Грина $G(\Phi|n, n'; t)$, а n_1 — импульс второй функции Грина $G(\beta|n_1, n'_1; t)$, получающейся из $G(\Phi|n, n'; t)$ заменой $V_{imp} \rightarrow -V_{imp}$. (Нештрихованные индексы относятся к левой вершине диаграммы, а штрихованные — к правой.) Другим множителем в сумме всех диаграмм будет петля из двух свободных функций Грина, в каждой вершине которой происходит рождение (уничтожение) двух

фермионов. (Это видно уже из исходного гамильтониана в терминах полей χ ; там стоят два оператора χ_2 , а не $\chi_2^\dagger \chi_2$.)

Теперь в выражениях для каждой из функций Грина, входящих в петлевую диаграмму, при $n \gg 1$ уже можно перейти от дискретных n к непрерывной переменной k обычным способом, считая, что $tv_c/L \ll 1$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \sum_{-N_1}^{N_1} \exp\{(2\pi i v_c n t/L)\} f(n) \rightarrow \\ \rightarrow \int_{-N_1}^{N_1} (dn) \exp\{(2\pi i v_c n t/L)\} f(n), \end{aligned}$$

а далее в нашей задаче необходим переход к термодинамическому пределу $N_1 \rightarrow \infty$ при конечном $k = 2\pi n/L$. Подставив в полученное выражение функции Грина из предыдущего раздела, легко убедиться, что это приводит нас к выражению для $\mathcal{S}$, расходящемуся в области больших импульсов.

Для того чтобы придать этому выражению математически осмысленный вид, его надо регуляризовать, введя функцию $\mathcal{F}_{PV}$, обеспечивающую сходимость всего выражения. Нам будет удобно использовать регуляризацию Паули–Вилларса, в которой вклад от ультрафиолетовой области (большие k) регуляризуется массой M_{PV} . Обычно в таких задачах требуется обеспечить сходимость подынтегральных выражений по всем независимым переменным. В нашем случае это были бы шесть импульсов. (Четыре импульса «неповернутых» полей и два сохраняющихся импульса «повернутых» полей.) Функция $\mathcal{F}_{PV}$ должна выходить на 1 при $kv_c \ll M_{PV} \ll M_b$ и быстро убывать в области больших k , обеспечивая сходимость всех интегрирований. (В дальнейшей теории должна быть сформулирована так, чтобы в окончательных выражениях оказалось возможным совершить предельный переход $M_{PV} \rightarrow \infty$, и это условие очень важно для перенормировки.) Тогда петлевые диаграммы до суммирования по индексам «неповернутых» полей m, m_1 (см. предыдущий раздел) записывались бы в виде

$$\begin{aligned} \sum_{n, \dots, n_1, \dots} \tilde{G}(\Phi|t, 0; n, m, m') \tilde{G}_2(\beta|t, 0; n_1, m_1, m'_1) \times \\ \times \mathcal{F}_{PV}(n, m, m'; n_1, m_1, m'_1). \end{aligned}$$

Получившиеся в результате суммирования по индексам «неповернутых» полей функции Грина в этом случае отличались бы от функций Грина (36)–(38) из-за зависимости $\mathcal{F}_{PV}$ от индексов «неповерну-

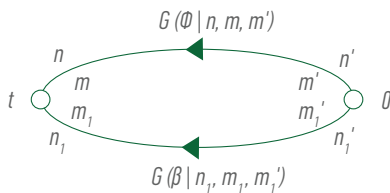


Рис. 1.

тых» полей. Однако оказывается, что в нашем случае достаточно регуляризовать петлевые диаграммы только по индексам «повернутых» полей. Чтобы убедиться в этом, вернемся к правилу сумм (35) и оставим из всего ряда $\mathcal{A}(y_n)$ только одно слагаемое с $m = n$ (в котором импульсы «повернутого» и «неповернутого» полей равны). Согласно уравнению (32) в термодинамическом пределе это соответствует замене $y_n \mathcal{A}(y_n) \rightarrow \mathcal{P}$. Учитывая условие существования решения для матрицы поворота (31) и выражение для $\mathcal{P}$ (см. Приложение В.1), снова получаем правую часть выражения (35):

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_1} \sum_{-N_1; m \neq 0}^{N_1} \frac{y_n + ((b+2)/b)m}{y_n - m} &= \\ &= \frac{1}{N_1} \left(y_n \mathcal{A}(y_n) + \frac{(b+2)}{b} B(y_n) \right) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{N_1} \mathcal{P} + \frac{b(b+2)}{2(b+1)} = b + 2. \end{aligned}$$

(В предыдущем разделе вычисления были сделаны так, чтобы была возможность учесть все члены ряда.) Таким образом, в термодинамическом пределе в петлевой диаграмме из всего ряда на самом деле выживает только одно слагаемое с $m = n$. Отсюда следует, что, обеспечив сходимость выражения по импульсу k_n , мы автоматически приходим к сходящемуся ответу и по импульсу «неповернутого» поля p_m . Точно так же обстоит дело и со всеми другими суммами, входящими в функции Грина, вычисленными в разд. 4.1. Таким образом, функция $\mathcal{F}_{PV}$ в нашем случае зависит только от двух переменных k_n, k_{n_1} , и мы можем использовать для дальнейших вычислений формулы (36)–(38) для функций Грина. С формальной точки зрения условие существования решения (31) в нашей задаче играет роль дополнительного условия, которое необходимо учитывать при регуляризации расходящегося ответа. Оно говорит, что расходящаяся в термодинамическом пределе сумма $B(y_n)$, получившаяся в результате суммирования по индексам «неповернутых» полей, на самом деле не имеет права зависеть от y_n при любых n . При нарушении этого условия уравнение для матрицы поворота не имеет решения.

Регуляризация типа Паули–Вилларса сводится к тому, что мы дописываем в подынтегральное выражение для петлевой диаграммы (39) по множителю

$$\mathcal{F}(k, M_{PV}) = \left[\frac{M_{PV}^2}{(v_c k)^2 + M_{PV}^2} \right]^n$$

на каждую функцию Грина, а степень n подбираем так, чтобы обеспечить сходимость интегралов. По-

скольку в ответ входят функции Грина с двумя производными, для обеспечения сходимости интегралов надо взять $n = 2$.

В Приложении С (уравнение (66)) показано, что регуляризованное выражение для коррелятора $\mathcal{S}(\omega)$ может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\omega) &= -(2\gamma_s)^2 \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) \int_0^\infty dt \cos(\omega t) \times \\ &\times \int_0^\infty (dk dk_1) \exp(itv_c(k + k_1)) \times \\ &\times \left[\frac{1}{2} (\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b)) (k + k_1)^2 - \right. \\ &\left. - k k_1 (\Phi_0(b) + \Phi_0(-b))^2 \right] \mathcal{F}(k, M_{PV}) \mathcal{F}(k_1, M_{PV}). \end{aligned} \quad (40)$$

Однако ответ, полученный в результате вычислений входящих в это выражение интегралов, не может рассматриваться как окончательный. Дело в том, что в отсутствие регуляризации он расходится, а это значит, что ответ для выражения (40) определяется видом функции $\mathcal{F}(M_{PV})$ (насколько быстро она обрезает расходящийся вклад от ультрафиолетовой области). Между тем этот коррелятор напрямую определяет наблюдаемую величину. Поэтому его зависимость от способа вычислений недопустима. Регуляризация — это не способ вычисления окончательного ответа, а просто вспомогательная процедура, необходимая для того, чтобы придать выражению осмысленный с математической точки зрения вид. Другое дело — процедура перенормировки, используемая для того, чтобы наблюдаемая величина не зависела бы от способа вычислений. (По сути, изложенная ниже процедура повторяет первый шаг построения теории ренормгруппы по Гелл-Ману–Лоу. Она имеет весьма общий характер и почти полностью переносится на другие задачи, в которых точные аналитические ответы расходятся в ультрафиолетовой области.) Схема перенормировки по Гелл-Ману–Лоу подразумевает не только вычисление этого выражения как функции M_{PV} . После этого нужно, считая M_{PV} сколь угодно большим, выделить в этом выражении главный (расходящийся в пределе $M_{PV} \rightarrow \infty$) множитель. Далее надо ввести перенормированную (за счет взаимодействия в ультрафиолетовой области) амплитуду рассеяния ($\gamma_{(ren)}$), зависящую от M_{PV} таким образом, чтобы сократить весь расходящийся в пределе $M_{PV} \rightarrow \infty$ множитель, возникающий при вычислении диаграммы. ($\gamma_{(ren)}$ не подлежит вычислению в

рамках данного подхода.) Подчеркнем, что только предел $M_{PV} \rightarrow \infty$ приводит (и то только в случае перенормируемых теорий) к независимости наблюдаемых величин от способа регуляризации расходящихся выражений.

Для того чтобы доказать возможность введения амплитуды $\gamma_{(ren)}$, необходимо ввести в гамильтониан специально подобранный контрчлен. Он должен зависеть от двух масштабов M_{PV} и M_{ren} — произвольная точка перенормировки. (Единственное ограничение на величину M_{ren} пока состоит в том, что мы считаем ее принадлежащей области, описываемой перенормированным одномерным КФ-гамильтонианом, т.е. $M_b \gg M_{PV} \gg M_{ren}$.) После этого надо повторить все изложенные выше вычисления наблюдаемой величины. Если контрчлен подобран правильно, то в итоге мы и должны получить ответ, в котором ультрафиолетовые расходимости сократятся за счет зависимости $\gamma_{(ren)}$ от M_{PV} . Такая процедура означает, что все расходимости будут «спрятаны» в $\gamma_{(ren)}$. Основная идея подобных процедур состоит в том, что мы изменяем неправильный в ультрафиолетовой области КФ-гамильтониан таким образом, чтобы наблюдаемые величины, вычисленные с помощью ренормированного КФ-гамильтониана, совпадали бы в длинноволновой области с ответами, вычисленными с помощью неизвестного нам точного гамильтониана, в котором ультрафиолетовые расходимости отсутствуют. В том случае, когда речь идет о точном решении, под M_{ren} нужно понимать точку, в которой ответ известен. В нашей задаче нужно потребовать, чтобы $|\mathcal{R}_\omega|^2(\omega/M_{ren} = 1) = |R_0|^2$ (высокочастотные отклики в фазе с нарушенной симметрией и в нормальной фазе всегда совпадают). Это — граничное условие, фиксирующее поведение теории в ультрафиолетовой области. При переходе к другой регуляризации изменится множитель, зависящий от способа регуляризации. Как следствие этого, другим будет контрчлен и неинформативная связь между перенормированной и затравочной амплитудами рассеяния. Однако зависимость наблюдаемых величин от физической амплитуды рассеяния в перенормируемых теориях останется той же, т.е. наблюдаемая величина $|\mathcal{R}_\omega|^2$ не будет зависеть от способа вычислений. (Подчеркнем, что доказательство перенормируемости теории тоже основывается на схеме перенормировки по Гелл-Ману–Лоу или эквивалентной ей схеме Вильсона. Кроме того, в процессе вычислений необходимо придерживаться единой схемы перенормировки для всех выражений.)

Таким образом, требование независимости наблюдаемых величин от способа регуляризации достигается за счет того, что мы считаем массу M_{PV} больше всех остальных (заранее нам неизвестных) параметров теории, а потом «прячем» эту величину в перенормированные константы гамильтониана. Фактически в процессе вычислений мы делаем предельный переход $M_{PV} \rightarrow \infty$, возвращающий наш ответ в исходную (расходящуюся) задачу. Это определяет и правила вычисления перенормируемой величины. В частности, в нашем случае нельзя менять порядок интегрирования в выражении (40): до вычисления интегралов по k первым выполнить интегрирование по времени «обычным способом» (сделав интеграл по t сходящимся за счет бесконечно малого сдвига частоты в комплексную плоскость). Фурье-преобразование, выполненное таким образом, автоматически доопределяет расходящуюся часть выражения (40) нулем. Действительно, с одной стороны расходимость действительной части исходного выражения (40) (точнее, величины $\mathcal{S}(\omega) - \mathcal{S}(0)$) при $M_{PV} \rightarrow \infty$ видна невооруженным взглядом: интегралы по k расходятся степенным образом. А при изменении порядка интегрирования вещественная часть выражения (40) будет пропорциональна $\delta(v_c(k + k_1) - |\omega|)$, что сразу делает ответ конечным при любом M_{PV} (в том числе и при $M_{PV} \rightarrow \infty$; $|\omega|/M_{PV} \ll 1$). Технически это происходит потому, что области интегрирования по k и k_1 в (40) при таком способе вычислений оказываются ограничены частотой (все k одного знака). Таким образом, перемена порядка интегрирования автоматически доопределяет расходящуюся при $M_{PV} \rightarrow \infty$ часть ответа нулем. Причина этого «парадокса» состоит в том, что эти два способа вычислений поразному доопределяют особенность, возникающую в длинноволновой асимптотике коррелятора $S(t)$ при $t \rightarrow 0$ (вне области ее применимости). Поэтому с точки зрения математической физики любая расходящаяся в ультрафиолетовой области теория полностью определена только тогда, когда задан не только гамильтониан, но и схема перенормировки. Отсюда следует, что выбор схемы перенормировки — это всегда вопрос, требующий обсуждения физической картины явления.

Разберемся с этим утверждением подробнее. Заметим, что вещественная часть коррелятора $\mathcal{S}(\omega) - \mathcal{S}(0)$ определяется вероятностью рождения электрон-дырочной пары нормальных возбуждений (полей χ_2 , см. гамильтониан (20)). Точнее, в его выражение входит вероятность рождения электрон-дырочной пары квазичастиц χ_2 , существующей

любое (в том числе и очень малое) время, что принципиально отличает нашу задачу от задачи рассеяния. В последней мы вычисляем вероятность перехода из начального состояния (заданного при $t \rightarrow -\infty$) в конечное ($t \rightarrow \infty$). Поэтому в задаче рассеяния вероятность должна быть пропорциональна $\delta(v_c(k + k_1) - |\omega|)$, т.е. δ -функции, выражающей закон сохранения энергии. Это и есть физическое требование, которое должно быть учтено в схеме перенормировки задачи рассеяния. Мы же вычисляем кондактанс (линейный отклик при $\omega \rightarrow 0$). А в него дают вклад и переходы между состояниями с плохо определенной энергией. Более того, как уже обсуждалось ранее, специфика нашей задачи состоит в том, что справа и слева от точечной примеси образуется скачок заряда, который не экранируется одномерными фермионами. (На самом деле электрически заряженный двойной слой, образующийся вокруг примеси, — это чисто гидродинамический эффект: поток, встретив препятствие, образует горб перед препятствием и впадину за ним. Характерный размер двойного слоя — порядка размера примеси: в нашем случае $\sim 1/p_F \rightarrow 0$.) Такой скачок заряда, приводящий в случае сильного e - e -взаимодействия к большой перенормировке амплитуды рассеяния, должен существовать и в подходе Кейна–Фишера. Величина перенормировки, возникающая из-за ультрафиолетовой расходимости $\mathcal{S}(t)$, определяется как раз малыми временами $t \leq 1/M_{PV}$, т.е. временами, за которые фермион не успел далеко отойти от примеси и сильнейшим образом взаимодействует с двойным слоем, существующим рядом с ней. На таких временах энергия плохо определена, т.е. говорить о существовании закона сохранения энергии в этом случае уже не приходится. Из-за ультрафиолетовой расходимости выражения для $\mathcal{S}(t)$ область $t \leq 1/M_{PV}$ дает главный вклад в $\gamma(\text{ren})$ и определяет наиболее медленную зависимость коэффициента отражения от частоты (об этом см. ниже). Вклад от больших времен, на которых выполняется закон сохранения энергии, конечно, тоже существует. Однако, как мы видели, он конечен и теряется в результате предельного перехода $M_{PV} \rightarrow \infty$ на фоне расходящегося ответа.

Правильность использования в нашей задаче схемы перенормировки по Гелл-Ману–Лоу доказывается окончательным ответом (уравнение (43)). Согласно ему, физическая амплитуда рассеяния (квадрат эффективной константы связи $\gamma_s(\mathcal{M}_{\text{ren}})\mathcal{M}_{\text{ren}}$), полученная в результате вычислений, оказалась безразмерной и независимой от точки ренормировки. Так и должно быть в перенормируемых теориях,

а перенормируемость означает и независимость наблюдаемой величины от способа регуляризации. Определение же расходящегося вклада от ультрафиолетовой области нулем заранее предполагает, что и в случае сильного e - e -взаимодействия кондактанс определяется только большими временами. В отличие от задачи рассеяния, для кондактанса это предположение не имеет физического обоснования и, на самом деле, сразу предопределяет ответы. В то же время переход к асимптотике $|\mathcal{R}_\omega|^2 \sim |\omega|$ как раз и должен происходить из-за того, что инфракрасная расходимость коррелятора $\mathcal{S}$ сменяется на ультрафиолетовую [11].

4.3. Перенормированный коэффициент отражения

В Приложении С показано, что регуляризованная по Паули–Вилларсу частотнозависящая часть коррелятора $\delta\mathcal{S}(\omega) = \mathcal{S}(\omega) - \mathcal{S}(0)$, определяемая выражением (40), может быть представлена в виде

$$\text{Re } \delta\mathcal{S}(\omega) = -F(V_{\text{imp}}) (\gamma_s(\mathcal{M}_b))^2 \omega^2 M_{PV}. \quad (41)$$

(Конкретный вид функции $F(V_{\text{imp}})$ нам не важен.) Это выражение линейно расходится при $M_{PV} \rightarrow \infty$, поэтому исходный гамильтониан (20) требует перенормировки. Будем рассматривать константу $\gamma(\mathcal{M}_b)$ как затравочный заряд локальной теории и вспомним, что настоящее рассеяние в области малых длин нелокально. Естественнo предположить, что наблюдая за рассеянием из одномерной области (большие длины), мы будем видеть перенормированное за счет взаимодействия в ультрафиолетовой области и точечное рассеяние фермионов примесью. Для решения такой задачи надо написать одномерный длинноволновый гамильтониан, зависящий от перенормированного заряда, который приведет к сходящемуся ответу для наблюдаемой величины, несмотря на существование ультрафиолетовой расходимости в одном из сомножителей выражения.

Попытаемся выяснить вид перенормированного гамильтониана. В результате вычислений с перенормированным гамильтонианом вместо выражения (41) должен получиться ответ, допускающий предельный переход $M_{PV} \rightarrow \infty$ и содержащий квадрат перенормированного заряда. Простейший вариант предполагаемого ответа имеет вид

$$\text{Re } \delta\mathcal{S}(\omega) = -\gamma_s^2(\mathcal{M}_{\text{ren}}) \frac{\mathcal{M}_{\text{ren}}}{M_{PV}} \odot F(V_{\text{imp}}) M_{PV} \omega^2.$$

(Все, что стоит после $\odot$, набирается от вычисления перенормированной петли, и этот сомножитель

будет одинаковым при любой константе связи, а $\mathcal{M}_{ren}/M_{PV}$ — простейшая безразмерная комбинация, позволяющая сократить M_{PV} в наблюдаемой величине.) Чтобы получить этот ответ, в гамильтониан нужно добавить контрчлен, пропорциональный $\hat{\chi}_2^\dagger(0)\partial_x\hat{\chi}_2^\dagger(0) - \partial_x\hat{\chi}_2(0)\hat{\chi}_2(0)$ с константой

$$\delta\gamma = \gamma(\mathcal{M}_{ren})\sqrt{\mathcal{M}_{ren}/M_{PV}} - \gamma(\mathcal{M}_b).$$

В итоге вся перенормированная константа, стоящая в гамильтониане, будет равна

$$\gamma_{ren} = \gamma(\mathcal{M}_{ren})\sqrt{\mathcal{M}_{ren}/M_{PV}} \propto 1/\sqrt{\mathcal{M}_{ren}M_{PV}},$$

$\gamma_{ren} \rightarrow 0$ при $M_{PV} \rightarrow \infty$.

С этим гамильтонианом вместо выражения (41) мы действительно получим

$$\text{Re } \delta\mathcal{S}(\omega) = -(\gamma_s(\mathcal{M}_{ren})\mathcal{M}_{ren})^2 F(V_{imp}) \frac{\omega^2}{\mathcal{M}_{ren}}. \quad (42)$$

Отметим, что разложение функции $\text{Re } \delta\mathcal{S}(\omega)$ идет по степеням $|\omega|/M_{PV}$, а не по $|\omega|/\mathcal{M}_{ren}$ (см. Приложение С). Поэтому следующие члены ряда будут равны нулю после предельного перехода $M_{PV} \rightarrow \infty$. Отсюда следует, что это выражение должно быть справедливым во всей одномерной области (т.е. и на достаточно больших частотах). Поэтому мы должны позаботиться о правильной высокочастотной асимптотике выражения (42). Для этого надо вычислить отклик невзаимодействующих носителей, рассеивающихся на примеси, и сравнить его с формулой (12), в которой стоит точный коррелятор $\text{Re } \delta\mathcal{S}_{exact}(\omega)$. В результате мы увидим, что $\text{Re } \delta\mathcal{S}_{exact}$ в области больших частот отличается от $|\omega||R_0|^2$ только численным коэффициентом. Поэтому, для того чтобы зафиксировать правильное поведение ренормированной теории в высокочастотной области, нам достаточно потребовать выполнения условия

$$|\mathcal{R}_\omega|^2(\omega = \mathcal{M}_{ren}) = |R_0|^2$$

при любой величине $|R_0|^2$. Такой выбор точки перенормировки означает, что в нашем случае масштаб $1/\mathcal{M}_{ren}$ — это тот масштаб, начиная с которого рассеяние квазичастиц на примеси может быть описано с помощью локальной, но перенормированной за счет взаимодействия в ультрафиолетовой области амплитуды рассеяния. Этот масштаб является единственным подгоночным параметром теории и не может быть вычислен в рамках модели. В итоге,

используя формулу (47), мы получаем ответ для фейнмановского коэффициента отражения:

$$|\mathcal{R}_\omega|^2 = |R_0|^2 \frac{|\omega|}{\mathcal{M}_{ren}}, \quad (43)$$

$$|R_0|^2 = \pi V_{imp}^2 (\gamma_s(\mathcal{M}_{ren})\mathcal{M}_{ren})^2 F(V_{imp})$$

($|\omega| \leq \mathcal{M}_{ren} \ll \mathcal{M}_b$). В этом выражении важно, что полученная в результате такой процедуры физическая амплитуда рассеяния фермионов на примеси, учитывающая сильное e – e взаимодействие в ультрафиолетовой области, оказалась пропорциональна $(\gamma_s(\mathcal{M}_{ren})\mathcal{M}_{ren})^2$, т.е. она безразмерна и не зависит от точки нормировки. Как это и должно быть в перенормируемой теории. (Одним из способов вывода уравнения Гелл-Мана–Лоу в теории ренормализационной группы как раз и служит требование независимости физической амплитуды рассеяния от импульса обрезания. В нашем подходе его роль играет $\mathcal{M}_{ren}$.)

Запаздывающий отклик получается из фейнмановского заменой $|\omega| \rightarrow \sqrt{(\omega + i\delta)^2}$ (см. Приложение А).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье вычисляется коэффициент отражения носителей от точечной примеси при $v_c = 1/2$, т.е. в области сильного фермион-фермионного взаимодействия (притяжение). Их рассеяние на примеси описывается с помощью туннельного гамильтониана, учитывающего только падающую и отраженную волны и пренебрегающего существованием прошедшей волны. До этого в работе [11] (подход со сшивкой решений нелинеаризованного уравнения Шредингера) в пределе бесконечно слабого примесного рассеяния предсказывалось, что при $v_c < 2/3$ инфракрасная расходимость выражения для кондактанса сменяется ультрафиолетовой, что приводит к смене частотной зависимости кондактанса с $|\omega|^{2\nu}$ на $|\omega|$. (Показатель степени частоты в случае сильного взаимодействия перестает зависеть от его величины.) Точное решение, существующее при $v_c = 1/2$ в подходе с туннельным гамильтонианом, подтверждает этот вывод. Все происходит по тому же сценарию: при произвольном примесном и сильном e – e рассеянии ($v_c = 1/2$) выражение для кондактанса расходится в ультрафиолетовой области. В итоге вместо пропорциональности квадрату частоты кондактанс зависит от частоты линейно. Физической причиной изменения частотной зависимости кондактанса является отсутствие закона сохранения

энергии при упругом рассеянии носителей на точечной примеси на очень малых временах, т.е. на таких временах, на которых величина энергии плохо определена. Именно эти времена из-за ультрафиолетовой расходимости и дают главный вклад в самую медленно убывающую по частоте асимптотику кондактанса.

Благодарности. Автор благодарен В. Ю. Петрову, обратившему мое внимание на возможность применения исходных предпосылок «возмущенческого» РГ-подхода к случаю сильного e - e -взаимодействия, и Я.М. Бельтюкову за чтение рукописи.

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ПЕРЕХОД ОТ ФЕЙНМАНОВСКОГО ОТКЛИКА К ЗАПАЗДЫВАЮЩЕМУ

Используя ответ для поляризационного оператора (9), можно представить фейнмановскую часть отклика, зависящую от примесного рассеяния и вычисленную при вещественных ω , в виде

$$\delta j_F(\omega, k) = \frac{\omega V_{imp}^2 \mathcal{S}_F(|\omega|)}{v_c^2 k^2 - \omega^2 - i\delta} \int (dq) \frac{E_{ext}(q, \omega)}{v_c^2 q^2 - \omega^2 - i\delta}. \quad (44)$$

Это выражение хорошо убывает по частоте при $|\omega| \rightarrow \infty$ и является точным во всей одномерной области. (Все ограничения по ω определяются приближениями, сделанными при вычислении функции $\mathcal{S}_F(|\omega|)$. Для получения запаздывающего отклика ($\delta j_{ret}(\omega, k)$) надо продолжить фейнмановский отклик (44), вычисленный при вещественных частотах, в аналитическую в верхней полуплоскости ω функцию. Для этого нам будет удобно перейти в координатное представление:

$$\begin{aligned} \delta \tilde{j}_F(\omega, x) &= \frac{i V_{imp}^2 \mathcal{S}_F(|\omega|)}{8 v_c^3 |\omega|} \times \\ &\times (\theta(x) \exp\{i|\omega|x/v_c\} + \theta(-x) \exp\{-i|\omega|x/v_c\}) \times \\ &\times \int (dq) E_{ext}(q, \omega) \left(\frac{1}{q - (\omega/v_c + i\delta \operatorname{sgn} \omega)} - \frac{1}{q + (\omega/v_c + i\delta \operatorname{sgn} \omega)} \right). \end{aligned} \quad (45)$$

Кроме того, нас интересует кондактанс, т.е. вещественная часть запаздывающего отклика в пределе $\omega \rightarrow 0$ при вещественных ω . Для перехода к запаздывающему отклику в (45) необходимо заменить $\omega^2 + i\delta \operatorname{sgn}(\omega) \rightarrow (\omega + i\delta)^2$ в полюсах подынтегральной функции. Остается разобраться, как надо

понимать множитель $\mathcal{S}_F(|\omega|)/|\omega|$. Заметим, что выражения для вещественной части фейнмановского, запаздывающего и опережающего откликов на вещественной оси должны быть одинаковыми и различаться только бесконечно малым сдвигом особенности, существующей в петлевой диаграмме при $\omega = 0$, в комплексную плоскость. Это означает, что в запаздывающей функции Грина в множителе $\mathcal{S}_F(|\omega|)/|\omega|$, вычисленном при вещественных частотах, под $|\omega|$ надо понимать $+\sqrt{(\omega + i\delta)^2}$ (корень определяется как функция комплексной переменной ω с фазой, равной нулю на верхнем берегу разреза, идущего вправо). В результате все получившееся выражение не будет иметь особенностей при $|\omega|/\mathcal{M} \ll 1$ в верхней полуплоскости по частоте (в этой области известно его аналитическое выражение). В области $|\omega|/\mathcal{M} \geq 1$ отношение $\mathcal{S}_F(|\omega|)/|\omega|$ перестает расти, и вся проводимость остается убывающей по частоте функцией (нас интересует отклик на медленно меняющееся по координате внешнее поле: $|q|v_c \ll |\omega|$). Конечно, получить аналитический ответ для $\mathcal{S}_F(|\omega|)/|\omega|$ в области $\omega \sim \mathcal{M}$ не представляется возможным, так как для этого необходимо знание гамильтониана в ультрафиолетовой области. Однако для аналитического продолжения низкочастотного отклика достаточно факта убывания проводимости $\sigma_F(\omega, k, q)$ (уравнение (44)) в области больших частот и при малых импульсах k и q (см. вторую половину разд. 2).

При получении ответа для кондактанса надо учесть, что зависящая от частоты часть $\operatorname{Re} \mathcal{S}_F(|\omega|)/|\omega| \rightarrow 0$ при $|\omega| \rightarrow 0$. Компенсировать это убывание в вещественной части отклика можно за счет полюсного вклада подынтегрального выражения, поэтому самая медленно убывающая асимптотика линейного отклика определяется выражением

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \delta j_{ret}(\omega, x) &= \\ &= -\frac{V_{imp}^2 \operatorname{Re}(\mathcal{S}(|\omega|)/|\omega|)}{8 v_c^2} \times \\ &\times (\theta(x) \exp\{i|\omega|x/v_c\} + \theta(-x) \exp\{-i|\omega|x/v_c\}) \times \\ &\times \int dq E_{ext}(q, \omega) (\delta(q - \omega/v_c) + \delta(q + \omega/v_c)). \end{aligned}$$

В этом выражении множитель $\operatorname{Re}(\mathcal{S}(|\omega|)/|\omega|)$ должен быть вычислен по фейнмановским правилам при вещественных ω (т.е. $\mathcal{S}(\omega)$ — это фурье-преобразование Т-упорядоченного антикоммутатора бозевских полей $\hat{s}$), а потом продолжен с вещественной оси в верхнюю полуплоскость заменой $|\omega| \rightarrow +\sqrt{(\omega + i\delta)^2}$.

Переходя к пределу $\omega \rightarrow 0$ (т.е. $\omega \ll v_c/L \sim T_c$), переписываем ответ в виде

$$\text{Re } \delta j(\omega, x) = \frac{V_{imp}^2 \text{Re}(S(|\omega|)/|\omega|)}{4v_c^2} \int_{-L/2}^{L/2} dx \partial U_{ext}(x, \omega).$$

Считая, что разность потенциалов медленно зависит от времени (или, что то же самое, она есть «размазанная» δ -функция частоты: $U_{ext}(\pm L/2, \omega) = 2\pi \Delta(\omega) U_{ext}(\pm L/2)$; $\int d\omega \Delta(\omega) = 1$), получаем обычное выражение для кондактанса:

$$\mathcal{G}(\omega) = \frac{e_0^2}{2\pi v_c} (1 - |R_\omega|^2), \quad (46)$$

в котором введен медленно зависящий от частоты коэффициент отражения носителей от примеси, равный¹⁾

$$|R_\omega|^2 = -\frac{\pi}{2v_c|\omega|} V_{imp}^2 \text{Re } S(|\omega|). \quad (47)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПОВОРОТА

Введенные нами майорановские поля λ и β вещественны, нормированы на длину канала и антикоммутируют друг с другом:

$$\{\hat{\lambda}(\epsilon_n), \hat{\lambda}(\epsilon_m)\} = L\delta_{n,-m},$$

а матрица поворота определялась нами как

$$\hat{\lambda}(\epsilon_n) = \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) \hat{\Phi}(m). \quad (48)$$

Уравнение для матрицы поворота следует из «стационарного уравнения Шредингера» $[\hat{\lambda}(n), \mathcal{H}]_- = \epsilon_n \hat{\lambda}(n)$, подстановки в него полей $\lambda(n)$ согласно определению (48) и варьированию получившегося выражения по полю Φ_m .

¹⁾ Во избежание недоразумений отметим, что используемый в этой статье термин «перенормированный взаимодействием коэффициент отражения фермионов от примеси» не совсем точен. Речь идет не об амплитуде рассеяния фермионов на примеси, а о том, что выражение для кондактанса выглядит с учетом взаимодействия привычным образом. Вычисляется же линейный отклик при $\omega \rightarrow 0$. В задачах, расходящихся в ультрафиолетовой области, это может не совпадать с величиной, получающейся из выражения для сечения рассеяния, когда задается начальное и конечное состояния при $t \rightarrow \pm\infty$ (см. обсуждение в конце разд. 4.2).

Таким образом, для получения примесной части уравнения нам нужно вычислить коммутаторы

$$\left[\frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) \hat{\Phi}(m), \frac{v_c}{2L} \sum_n \hat{\Phi}(-p_n) p_n \hat{\Phi}(p_n) + \right. \\ \left. + \gamma \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} \hat{\Phi}(p_{m_1}) \frac{1}{L} \sum_{m_2 \neq 0} p_{m_2} \hat{\Phi}(p_{m_2}) \right].$$

- Коммутируем первый член с кинетической энергией, учитывая что

$$LS(\epsilon_n, p_m) (\delta_{m,m_1} \hat{\Phi}_{m_1} - \delta_{m,-m_1} \hat{\Phi}_{-m_1}) p_{m_1} = \\ = L(p_m S(\epsilon_n, p_m) + p_m S(\epsilon_n, p_m)) \hat{\Phi}_m,$$

получаем вклад в коммутатор, равный

$$\frac{v_c}{L} \sum_{m_1 \neq 0} p_{m_1} S(\epsilon_n, p_{m_1}) \hat{\Phi}(p_{m_1}).$$

- Коммутатор первого члена с примесным рассеянием равен

$$\gamma \frac{1}{L^2} \sum_{m, m_1 \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) \times \\ \times (\delta_{m,-m_1} p_{m_2} \hat{\Phi}_{m_2} - \delta_{m,-m_2} p_{m_2} \hat{\Phi}_{-m_1}) = \\ = \gamma \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} p_{m_1} \hat{\Phi}_{m_1} + \\ + \gamma \frac{1}{L} \sum_{m \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) p_m \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} \hat{\Phi}_{m_1}.$$

- Правая часть уравнения есть

$$\epsilon_n \frac{1}{L} \sum_{m_1 \neq 0} S(\epsilon_n, p_{m_1}) \hat{\Phi}(p_{m_1}).$$

Варьируя получившееся «стационарное уравнение Шредингера» по $\hat{\Phi}(k_m)$ (m — любое, включая n), получаем уравнение для матрицы поворота:

$$(\epsilon_n - v_c k_m) S(\epsilon_n, k_m) = \\ = \gamma k_m \frac{1}{L} \sum_{m_1} S(\epsilon_n, p_{m_1}) + \gamma \frac{1}{L} \sum_{m_1} p_{m_1} S(\epsilon_n, p_{m_1}). \quad (49)$$

Нам осталось получить выражение для обратной матрицы поворота (S^{-1}) :

$$\hat{\Phi}(p_{m_1}) = \frac{1}{L} \sum_{n_1 \neq 0} S^{-1}(\epsilon_{n_1}, p_{m_1}) \hat{\lambda}(\epsilon_{n_1}). \quad (50)$$

Подставляя его в выражение (48), получаем

$$\hat{\lambda}(\epsilon_n) = \frac{1}{L^2} \sum_{m, n_1 \neq 0} S(\epsilon_n, p_m) S^{-1}(\epsilon_{n_1}, p_m) \hat{\lambda}(\epsilon_{n_1}). \quad (51)$$

Теперь нам необходимо учесть, что майораны вещественны и должны антикоммутировать. Для этого запишем антикоммутатор полей λ в терминах «неповернутых» полей:

$$\frac{1}{L^2} \sum_{m_1; m_2 \neq 0} S(\epsilon_n, p_{m_1}) S(\epsilon_m, p_{m_2}) \{\hat{\Phi}(m_1), \hat{\Phi}(m_2)\} = L \delta_{n, -m},$$

т.е.

$$\delta_{n, m} = \frac{1}{L^2} \sum_{m_1 \neq 0} S(\epsilon_n, p_{m_1}) S(\epsilon_{-m}, p_{-m_1}).$$

Отсюда сразу следует, что если элементы обратной матрицы поворота удовлетворяют условию

$$S^{-1}(\epsilon_n, p_m) = S(\epsilon_{-n}, p_{-m}), \quad (52)$$

то равенство (51) превращается в тождество. (Впрочем, это соотношение лишь показывает, что матрица поворота унитарна.)

В.1. Спектр

Система уравнений (29), (30), определяющая матрицу поворота, зависит от расходящихся в термодинамическом пределе ($N_1 \rightarrow \infty$) сумм. При симметричной регуляризации

$$\mathcal{A}(y) = \sum_{-N_1, m \neq 0}^{N_1} \frac{1}{y - m} = \pi \operatorname{ctg}(\pi y) - \frac{1}{y} + \mathcal{O}(1/N_1), \quad (53)$$

$$B(y, N_1) = \sum_{-N_1}^{N_1} \frac{m}{y - m} = y \mathcal{A}(y, N_1) - 2N_1,$$

$$C(y, N_1) = \sum_{-N_1}^{N_1} \frac{m^2}{y - m} = y B(y).$$

В этих обозначениях уравнения для матрицы поворота переписываются в виде

$$b N_1 \mathcal{Z}(y_n) = B(y, N_1) \mathcal{Z}(y_n) + \frac{2\pi}{L} C(y_n) Y(y_n) = 0, \quad (54)$$

$$b N_1 Y(y_n) = \frac{2\pi}{L} \mathcal{A}(y_n) \mathcal{Z}(y_n) + B(y_n) Y(y_n).$$

Условие существования решения уравнений дает точное уравнение для спектра:

$$B(y_n) = \frac{b^2 N_1}{2(b+1)}, \quad (55)$$

а последнее уравнение — связь между $Y(y_n)$ и $\mathcal{Z}(y_n)$:

$$Y(y_n) = \frac{b+2}{b} \frac{v_c}{\epsilon_n} \mathcal{Z}(y_n).$$

Таким образом, вся матрица поворота имеет вид

$$S(\epsilon_n, k_m) = \frac{\mathcal{Z}(y_n) L}{2\pi v_c (n - m)} \left[1 + \frac{b+2}{b} \frac{m}{n} \right]. \quad (56)$$

Из условия унитарности поворота

$$\frac{1}{L} \sum_{-N_1; m \neq 0}^{N_1} S(\epsilon_{-n}; p_{-m}) S(\epsilon_n; p_m) = L \quad (57)$$

мы можем получить выражение для $\mathcal{Z}(y_n)$:

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{1}{2\pi v_c} \right)^2 \mathcal{Z}(y_n) \mathcal{Z}(y_{-n}) \times \\ & \times \sum_{-N_1; m \neq 0}^{N_1} \left[1 + \frac{b+2}{b} \frac{m}{n} \right]^2 / (n - m)^2 = 1. \end{aligned} \quad (58)$$

Для того чтобы вычислить последнее слагаемое, введем

$$\begin{aligned} S_0(y, N_1) &= \sum_{-N_1, m \neq 0}^{N_1} \frac{1}{(y - m)^2} = -\partial_y \mathcal{A}(y) = \\ &= -\partial_y [(B(y) + 2N_1)/y], \\ S_1(y, N_1) &= \sum_{-N_1}^{N_1} \frac{m}{(y - m)^2} = -\partial_y [y \mathcal{A}(y, N_1)], \\ S_2(y, N_1) &= \sum_{-N_1}^{N_1} \frac{m^2}{(y - m)^2} = -\partial_y [y B(y)] = \\ &= -\partial_y [-2y N_1 + y^2 \mathcal{A}(y)]. \end{aligned} \quad (59)$$

В терминах этих сумм уравнение (58) записывается в виде

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{1}{2\pi v_c} \right)^2 \mathcal{Z}(y_n) \mathcal{Z}(y_{-n}) \left[S_0(y, N_1) + \right. \\ & \left. + 2 \frac{b+2}{y b} S_1(y, N_1) + \left(\frac{b+2}{y b} \right)^2 S_2(y, N_1) \right] = 1. \end{aligned}$$

Последний множитель в этой формуле равен

$$\begin{aligned} [\dots] &= -\partial_y \mathcal{A}(y) \left(1 + \frac{b+2}{b} \right)^2 - \\ & - 2 \mathcal{A}(y) \frac{b+2}{y b} \left(1 + \frac{b+2}{b} \right) + 2 N_1 \left(\frac{b+2}{y b} \right)^2, \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{A}(y) = \pi \operatorname{ctg}(\pi y) - \frac{1}{y}, \quad \partial \mathcal{A}(y) = -\frac{\pi^2}{\sin^2 \pi y} + \frac{1}{y^2}.$$

Нам будет удобно записать $\sin^2 \pi y$ в виде, следующим из точного уравнения для спектра:

$$\left[1 + \left(\frac{\mathcal{P}}{\pi y}\right)^2\right] \sin^2 \pi y = 1, \quad \mathcal{P}^2 = \left[N_1 \frac{(b+2)^2}{2(b+1)} + 1\right]^2. \quad (60)$$

В итоге имеем

$$[\dots] = \frac{1}{y^2} \left[\frac{4(b+1)^2}{b^2} (\mathcal{P}^2 - 1) - 2N_1 \frac{(b+2)}{b^2} (b+1) + 2N_1 \frac{(b+2)^2}{b^2} \right] + 4\pi^2 \frac{(b+1)^2}{b^2}.$$

Нам нужен термодинамический предел выражения для матрицы поворота. Будем считать, что $N_1|b+2| \gg 1$. В таком случае $\mathcal{P} \sim N_1$, поэтому второе и третье слагаемое в этом выражении дадут посттермодинамические поправки порядка $O(1/N_1)$. Последнее же слагаемое приведет к регуляризации выражения для $\mathcal{Z}$ при малых y_n и его надо оставить. Таким образом,

$$\begin{aligned} [\dots] &= \left(\frac{2\pi(b+1)}{yb}\right)^2 [\tilde{N}_1^2 + y^2], \\ \tilde{N}_1 &= N_1(b+2)^2/2\pi(b+1), \\ \mathcal{Z}(\epsilon_n) &= \frac{bv_c}{b+1} \frac{y_n}{[\tilde{N}_1^2 + y_n^2]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (61)$$

Подставляя это выражение в уравнение (56), имеем окончательное выражение для матрицы поворота:

$$S(\epsilon_n, k_m) = \frac{Lz_0}{[\tilde{N}_1^2 + y_n^2]^{1/2}} \frac{y_n}{y_n - m} \left[1 + \frac{b+2}{b} \frac{m}{y_n}\right], \quad (62)$$

где $z_0 = b/2\pi(b+1)$. Прямым вычислением можно показать, что это выражение удовлетворяет условию унитарности (57).

При $n, N_1 \gg 1$ точное выражение для спектра (60) переходит в

$$y_n = n \left(1 + \frac{1}{\pi n} \arcsin \frac{\pi n}{\sqrt{\mathcal{P}^2 + \pi^2 n^2}}\right) \sim n + \frac{n}{\mathcal{P}} \quad (63)$$

(в такой записи $\arcsin$ понимается в смысле главного значения).

ПРИЛОЖЕНИЕ С. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯТОРА S

Подставляя выражения (36)–(38) для одночастичных функций Грина в (39), получаем выраже-

ние для регуляризованного коррелятора псевдоскалярной плотности:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(t) &= -(2\gamma_s)^2 \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) \times \\ &\times \int (dk dk_1) \exp(itv_c(k+k_1)) (k\Phi_0(b) - k_1\Phi_0(-b))^2 \times \\ &\times [\theta(t)\theta(k) - \theta(-t)\theta(-k)][\theta(t)\theta(k_1) - \\ &- \theta(-t)\theta(-k_1)] \mathcal{F}(k, M_{PV}) \mathcal{F}(k_1, M_{PV}). \end{aligned} \quad (64)$$

Для дальнейшего вычисления нам будет удобно воспользоваться тем, что за исключением множителя $(k\Phi_0(b) - k_1\Phi_0(-b))^2$ остальное подынтегральное выражение симметрично относительно замены $k < - > k_1$. Тогда этот множитель можно представить в виде

$$\begin{aligned} &(\Phi_0(b)k - \Phi_0(-b)k_1)^2 \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{2}(\Phi_0(b)^2 + \Phi_0(-b)^2)(k+k_1)^2 - k k_1 (\Phi_0(b) + \Phi_0(-b))^2. \end{aligned}$$

Поэтому все выражение записывается как

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(t) &= -(2\gamma_s)^2 \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) \times \\ &\times \int (dk dk_1) \exp(itv_c(k+k_1)) \times \\ &\times \left[\frac{1}{2}(\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b))(k+k_1)^2 - \right. \\ &- k k_1 (\Phi_0(b) + \Phi_0(-b))^2 \left. \right] \times \\ &\times [\theta(t)\theta(k)\theta(k_1) + \theta(-t)\theta(-k)\theta(-k_1)] \times \\ &\times F(k, M_{PV}) F(k_1, M_{PV}). \end{aligned} \quad (65)$$

Для вычисления перенормированного коэффициента отражения фермионов от примеси нам будет нужна вещественная часть фурье-преобразования этого выражения. Меняя в последнем слагаемом получившегося выражения $t; k_{1,2} \rightarrow -t; -k_{1,2}$, имеем

$$\begin{aligned} \text{Re } \mathcal{S}(\omega) &= -2(2\gamma_s)^2 \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) \times \\ &\times \text{Re} \int_0^\infty dt \cos(\omega t) \int_0^\infty (dk dk_1) \exp(itv_c(k+k_1)) \times \\ &\times \left[\frac{1}{2}(\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b))(k+k_1)^2 - \right. \\ &- k k_1 (\Phi_0(b) + \Phi_0(-b))^2 \left. \right] \times \\ &\times \mathcal{F}(k, M_{PV}) \mathcal{F}(k_1, M_{PV}). \end{aligned} \quad (66)$$

Из этого выражения видно, что в подынтегральном выражении по k у нас выделились две структуры: $(k+k_1)^2$ и $k k_1$.

- Слагаемое с $(k+k_1)^2$. Понизить степень знаменателя в выражении для функции $\mathcal{F}(k, M_{PV})$ можно, записав квадрат выражения, стоящего в $\mathcal{F}(k, M_{PV})$, как производную по M_{PV} , а $(k+k_1)^2$ — как ∂_t^2 от экспоненты. Таким образом, весь интеграл по $dkdk_1$ представляется в виде

$$-\frac{1}{(4\pi v_c)^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \times \left[\int dk \exp\{itv_c k\} (M_{PV}^3 \frac{\partial}{\partial M_{PV}} \frac{1}{k^2 v_c^2 + M_{PV}^2}) \right]^2,$$

и все первое слагаемое равно

$$\begin{aligned} \text{Re } \mathcal{S}_1(\omega) = & (2\gamma_s)^2 \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) (\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b)) \frac{M_{PV}^6}{(4\pi v_c)^2} \times \\ & \times \text{Re} \int_0^\infty \cos \omega t dt \times \\ & \times \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\frac{\partial}{\partial M_{PV}} \int_0^\infty dk \frac{\exp\{itv_c k\}}{k^2 v_c^2 + M_{PV}^2} \right]^2. \end{aligned}$$

Это равенство удобно выразить через интеграл Лапласа ($\mathcal{L}_a$) и Раабе ($\mathcal{R}_a$) [22]:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk \frac{\exp\{itv_c k\}}{k^2 v_c^2 + M_{PV}^2} = & \\ = \frac{v_c}{M_{PV}} (\mathcal{L}_a(M_{PV}t) + i\mathcal{R}_a(M_{PV}t)). \end{aligned}$$

Интеграл Лапласа экспонциально убывает при $M_{PV}t \gg 1$ и стремится к постоянному значению в обратном предельном случае. А интеграл Раабе при $M_{PV}t \gg 1$ убывает как $1/M_{PV}t$, а при малом значении аргумента

$$\mathcal{R}_a(M_{PV}t) \simeq -(\gamma_E + \ln(M_{PV}t))M_{PV}t.$$

Это позволяет нам записать предыдущее выражение в виде

$$\begin{aligned} \text{Re } \mathcal{S}_1(\omega) = & \frac{\gamma_s^2}{(2\pi)^2} \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) (\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b)) M_{PV}^6 \times \\ & \times \text{Re} \int_0^\infty \cos \omega t dt \times \\ & \times \partial_t^2 \left[\frac{\partial}{\partial M_{PV}} \frac{1}{M_{PV}} (\mathcal{L}_a(M_{PV}t) + i\mathcal{R}_a(M_{PV}t)) \right]^2. \end{aligned}$$

Далее мы должны учесть, что хотя нас и интересует предел $M_{PV} \rightarrow \infty$, но безразмерное время $\tau = M_{PV}t$ при этом может быть любым. После дифференцирования по M_{PV} мы уже можем перейти к безразмерному времени:

$$\begin{aligned} \partial_{M_{PV}} \frac{1}{M_{PV}} (\mathcal{L}_a(M_{PV}t) + i\mathcal{R}_a(M_{PV}t)) = & \\ = \frac{1}{M_{PV}^2} \left[-1 + \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right] (\mathcal{L}_a(\tau) + i\mathcal{R}_a(\tau)). \end{aligned}$$

Заметим, что все выражение для коррелятора не имеет неинтегрируемых особенностей при $\tau \rightarrow 0$ и хорошо сходится на больших τ :

$$\begin{aligned} -\mathcal{R}_a(\tau) + \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{R}_a(\tau) &= -\frac{2}{\tau}, \quad \tau \gg 1, \\ -\mathcal{R}_a(\tau) + \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{R}_a(\tau) &= -\tau, \quad \tau \ll 1. \end{aligned}$$

Поэтому при вычислении вещественной части частотнозависящего вклада, возникающего от этого слагаемого в вещественной части (66), мы можем дважды проинтегрировать по частям. В итоге все выражение окажется пропорциональным

$$\begin{aligned} M_{PV} \omega^2 \int_0^\infty d\tau \cos(\omega\tau/M_{PV}) \{ [(1-\tau \frac{\partial}{\partial \tau}) \mathcal{L}_a(\tau)]^2 - & \\ - [(1-\tau \frac{\partial}{\partial \tau}) \mathcal{R}_a(\tau)]^2 \}. \end{aligned}$$

Учитывая, что подынтегральное выражение быстро убывает при $\tau \gg 1$ (т.е. $\cos(\omega\tau/M_{PV})$ можно заменить на 1), видим, что весь интеграл по τ дает коэффициент порядка 1 при $M_{PV}\omega^2$. В результате вся частотнозависящая часть этого слагаемого равна

$$\text{Re } \delta \mathcal{S}_1(\omega) = -\gamma_s^2 F_1(V_{imp}) M_{PV} \omega^2, \quad (67)$$

$$\begin{aligned} F_1(V_{imp}) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \Phi_0^2(b) \Phi_0^2(-b) (\Phi_0^2(b) + \Phi_0^2(-b)) \times \\ & \times \int_0^\infty d\tau \{ [(1-\tau \frac{\partial}{\partial \tau}) \mathcal{L}_a(\tau)]^2 - [(1-\tau \frac{\partial}{\partial \tau}) \mathcal{R}_a(\tau)]^2 \}. \end{aligned} \quad (68)$$

- Слагаемое с kk_1 . В этом случае интегралы по k пропорциональны

$$\begin{aligned} -\frac{1}{(4\pi v_c)^2} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int dk \exp\{itv_c k\} \times \right. & \\ \left. \times (M_{PV}^3 \frac{\partial}{\partial M_{PV}} \frac{1}{k^2 v_c^2 + M_{PV}^2}) \right]^2. \end{aligned}$$

Заметив, что

$$\begin{aligned}\partial_t \partial_{M_{PV}} \frac{1}{M_{PV}} (\mathcal{L}_a(M_{PV}t) + i\mathcal{R}_a(M_{PV}t)) = \\ = \frac{\tau}{M_{PV}} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} (\mathcal{L}_a(\tau) + i\mathcal{R}_a(\tau)),\end{aligned}$$

это выражение удобно переписать в виде

$$\text{Re } \delta S_2(\omega) = \gamma_s^2 F_2(V_{imp}) M_{PV} \omega^2, \quad (69)$$

$$\begin{aligned}F_2(V_{imp}) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^2} \Phi_0(b)^2 \Phi_0(-b)^2 (\Phi_0(b) + \Phi_0(-b))^2 \times \\ \times \int_0^\infty \tau^4 d\tau \{ [\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \mathcal{L}_a(\tau)]^2 - [\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \mathcal{R}_a(\tau)]^2 \}. \quad (70)\end{aligned}$$

При этом переходе мы снова учли, что подынтегральные выражения быстро убывают при $\tau \gg 1$. Это позволило ограничиться первым членом разложения $\sin^2(\omega\tau/2M_{PV})$ для частотнозависящей части коррелятора.

В итоге мы убедились, что вещественная часть петлевой диаграммы пропорциональна $-\gamma_s^2 M_{PV} \omega^2$ с коэффициентом, равным

$$F(V_{imp}) = F_1(V_{imp}) - F_2(V_{imp}).$$

Во всех этих вычислениях важно, что все наши подынтегральные выражения не расходятся при $\tau \rightarrow 0$, а сами интегралы определяются областью $\tau \sim 1$.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950).
2. J. Schwinger, Phys. Rev. **128**, 2425 (1962).
3. G. S. Danilov, I. T. Dyatlov, and V. Yu. Petrov, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **78**, 1314 (1980) [Sov. Phys. JETP **51**, 663 (1980)].
4. C. L. Kane and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **46**, 15233 (1992).
5. A. Furusaki and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **47**, 4631 (1993).
6. L. I. Glazman, K. A. Matveev, and D. Yue, Phys. Rev. B **49**, 1966 (1994).
7. D. N. Aristov and P. W. Wölffe, Phys. Rev. B **80**, 045109 (2009).
8. V. V. Afonin and V. Yu. Petrov, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 355601 (2018).
9. A. Furusaki, Phys. Rev. B **56**, 9352 (1997).
10. P. Fendley, A. W. W. Ludwig, and H. Saleur, Phys. Rev. B **52**, 8934 (1994).
11. V. V. Afonin and V. Yu. Petrov, Pis'ma v ZhETF **97**, 587 (2013).
12. J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. **6**, 57 (1961).
13. V. V. Afonin and V. Yu. Petrov, JETP Lett. **109**, 762 (2019).
14. Б. Л. Иоффе, УФН **178**, 647 (2008).
15. M. Peskin and D. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley (1996), pp. 654–656.
16. V. V. Afonin and V. Yu. Petrov, JETP Lett. **101**, 622 (2015).
17. J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959).
18. V. V. Afonin and S. V. Gantsevich, Cond. Mat. **4**, 62 (2019); doi: 10.3390/condmat4030062.
19. В. В. Афонин, В. Ю. Петров, ЖЭТФ **134**, 637 (2008).
20. F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
21. V. V. Afonin and V. Yu. Petrov, Found. Phys. **40**, 190 (2010); doi: 10.1007/s10701-009-9385-7.
22. H. Bateman and A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions*, Mc Graw-Hill Book Company, New York (1953), Vol. 2, p. 148.

КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ ГАЗООБРАЗНЫХ ГЕЛИЯ И ДЕЙТЕРИЯ В СФЕРИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЯХ ПРИ ТЕРАПАСКАЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

М. В. Жерноклетов, **С. Ф. Маначкин**, **Н. Б. Давыдов***, **В. А. Раевский**, **А. О. Бликов**,
К. Н. Панов, **А. В. Рыжков**, **В. А. Аринин**, **Б. И. Ткаченко**, **А. И. Логвинов**,
А. В. Дегтярев, **В. А. Комраков**, **А. И. Давыдов**, **Н. Н. Анашкин**, **В. В. Хрусталева**

*Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 13 апреля 2022 г.,
после переработки 9 сентября 2022 г.
Принята к публикации 9 сентября 2022 г.

Приведены результаты четырех экспериментов по исследованию предварительно статически сжатых газообразных гелия и дейтерия при их последующем обжатии во взрывных сферических каскадных конструкциях, обеспечивающих квазиизэнтропическое сжатие исследуемых газов. Для гелия достигнуты следующие значения: давление сжатия $P_{mean} \approx 4.9$ ТПа при плотности $\rho_{max} \approx 6.4$ г/см³, степень сжатия $\delta = \rho/\rho_0 \approx 320$ в одном эксперименте и $P_{mean} \approx 10.9$ ТПа, $\rho_{max} \approx 10.3$ г/см³, $\delta \approx 470$ в другом. Для дейтерия эти параметры составляют $P_{mean} \approx 3.4$ ТПа, $\rho_{max} \approx 6.0$ г/см³, $\delta \approx 162$ в одном эксперименте и $P_{mean} \approx 13.3$ ТПа, $\rho_{max} \approx 11.4$ г/см³, $\delta \approx 520$ в другом. Плотность газов определялась рентгенографическим методом по положению границ стальных оболочек, сжимающих газ. Эксперименты моделировались по одномерной газодинамической программе, в которой для изучаемых газов использовались уравнения состояния Копышева–Хрусталева. Давления получены из расчетов, в которых удалось удовлетворительно описать динамику сжатия газов во всей совокупности экспериментов.

DOI: 10.31857/S0044451023020116
EDN: OQWECN

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию термодинамических свойств гелия, водорода и дейтерия при высоких давлениях и температурах связан с их широким распространением в природе и применением в различных высокоэнергетических конструкциях. Для изучения процессов в недрах планет-гигантов, а также многочисленного отряда так называемых внесолнечных планет необходимо знать, как меняются параметры уравнения состояния (УРС), в том числе в процессе изэнтропического сжатия этих газов и их смесей [1–3].

Отметим, что работы по изучению УРС водорода, дейтерия и гелия в широких диапазонах давле-

ний и температур ведутся во ВНИИЭФ на протяжении многих лет. Результаты первых экспериментов по исследованию газообразного водорода до давления $P \approx 1000$ ГПа опубликованы в 1972 г. Кормером и его сотрудниками [4]. В опытах исследовалось сжатие водорода стальной сферической оболочкой, сходящейся к центру под действием продуктов взрыва (ПВ). В дальнейшем различными группами исследователей проводились эксперименты по сжатию изотопов водорода в газообразном, жидком и твердом состояниях по следующим направлениям динамических исследований: ударно-волновому, квазиизэнтропическому и изэнтропическому сжатиям. Для создания высоких ударно-волновых давлений применялись устройства сферической геометрии [5, 6]. Квазиизэнтропические режимы сжатия исследовали в устройствах цилиндрической и сферической геометрии с использованием в качестве энергетического источника взрывчатого вещества (ВВ) [7, 8]. Процессы изэнтропического сжатия исследовали в

* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

устройствах цилиндрической геометрии с применением магнитного поля, создаваемого генератором МК-1 [9]. Наибольшие сжатия и давления реализуются в каскадных сферических устройствах [10–12]. Полученные экспериментальные данные служат тестовым материалом для теоретических моделей и основой для калибровки полуэмпирических широкодиапазонных УРС.

Несмотря на уже достаточно большой объем проведенных экспериментов, еще нет оснований считать работы по изучению УРС изотопов водорода и гелия завершенными, и в ряде случаев необходимы дополнительные исследования. Одна из причин увеличения числа экспериментов связана с единичными измерениями для каждой вновь испытываемой конструкции. Отметим, что исходных состояний на изэнтропах сжатия для каждой конструкции немного, но они различаются. Практика показывает, что плотность газа в сферических устройствах определяется с погрешностью 13–15%. Повысить степень доверия к результатам можно за счет увеличения статистики экспериментов.

В настоящей работе приводятся постановка и результаты четырех экспериментов по исследованию сжатия газообразных гелия и дейтерия во взрывных сферических каскадных конструкциях, обеспечивающих квазиизэнтропическое сжатие исследуемых газов.

2. ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперименты выполнены с использованием рентгеновского комплекса РФЯЦ-ВНИИЭФ. Постановка подобных экспериментов подробно описана в ряде работ (см., например, [12]). Комплекс позволяет в одном взрывном эксперименте получить до девяти рентгено снимков полости с исследуемым газом в различные моменты процесса сжатия.

Схема проведения взрывных экспериментов с использованием многокадровой рентгеновской установки представлена на рис. 1. Собранный сферическое устройство 1, размещенное внутри защитного однослойного (двухслойного для опытов №3, 4) стального цилиндра 2, установлено между двумя защитными сооружениями 3 и 4. В защитных сооружениях 3 находится рентгенографический комплекс РФЯЦ-ВНИИЭФ, состоящий из трех бетатронов БИМ234.3000 5 с граничной энергией электронов 53 МэВ и линейного индукционного ускорителя ЛИУ-Р-Т 9 с граничной энергией электронов 12 МэВ. Бетатроны работают в режиме по-

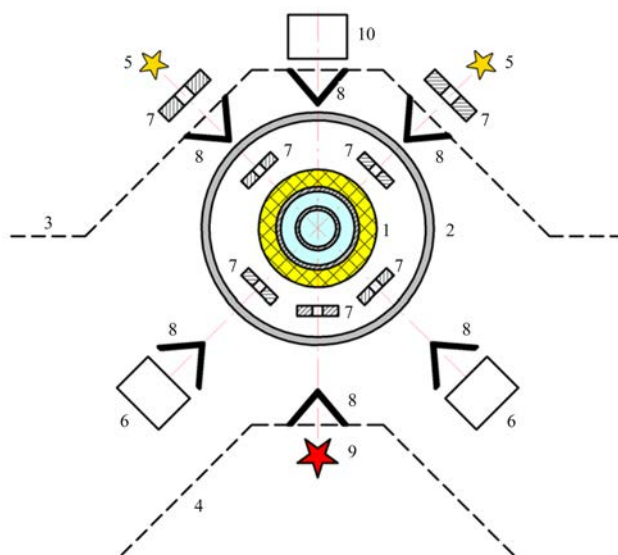


Рис. 1. Схема проведения взрывных экспериментов с использованием многокадровой рентгеновской установки: 1 — экспериментальное устройство в сборе; 2 — защитный цилиндр (локализирующее устройство); 3, 4 — защитные сооружения; 5 — бетатроны БИМ234.3000 [13]; 6 — регистраторы; 7 — коллиматоры (Pb); 8 — защитные конусы (Al); 9 — ЛИУ-Р-Т [14]; 10 — пакет ADC-экранов

следовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. Для ЛИУ-Р-Т длительность импульса излучения не превышает 50 нс.

Для регистрации рентгеновского излучения в боковых проекциях использовали оптико-электронную систему детектирования 6. Для регистрации рентгеновского излучения в центральной проекции использовали набор из десяти фотохромных экранов 10 на основе галогенида бария, активированного европием (ADC-экраны).

Для снижения влияния рассеянного излучения размер поля регистрации ограничивали коллиматорами 7. Для защиты от воздействия продуктов взрыва бетатронов 5, ЛИУ-Р-Т 9 и регистраторов рентгеновского излучения 6, 10 применены алюминиевые конусы 8.

Полученные рентгеновские изображения обрабатывались цифровым методом [15]. В результате определялись величины эквивалентных радиусов (радиусов сфер, имеющих тот же объем, что и объем полости, граница которой определена методом функциональной трассировки) полости с газом в различные моменты времени, которые затем сравнивались с соответствующими расчетными зависимостями радиуса полости с газом от времени.

Таблица 1. Начальные давления и плотности газов в полостях, температура среды, масса ВВ в экспериментах

№ опыта	P_1 , МПа/He	P_2 , МПа/газ	ρ_{01} , г/см ³	ρ_{02} , г/см ³	T_0 , °С	M_{expl} , кг Т.Э.
1	24.24	11.77/He	0.039	0.02	−5	52
2	24.94	24.50/D ₂	0.037	0.036	+15	52
3	13.77	13.75/D ₂	0.022	0.022	+10	117
4	13.56	13.57/He	0.022	0.022	+5	117

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА

Общий вид и физические схемы сферических экспериментальных устройств показаны на рис. 2 и 3 соответственно.

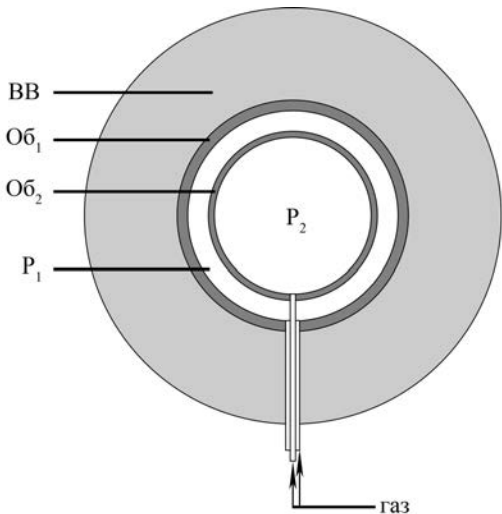


Рис. 2. Экспериментальное двухкаскадное сферическое устройство с разделенными полостями: Об₁, Об₂ — оболочки первого и второго каскадов; P₁, P₂ — давление газа в полости между оболочками и в центральной полости

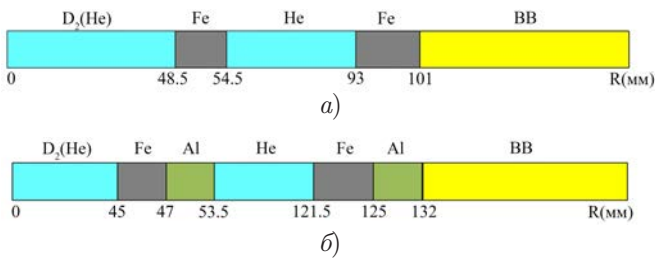


Рис. 3. Схемы двухкаскадных сферических устройств: а) опыты №№1, 2, устройство 1; б) опыты №№3, 4, устройство 2

Общее в этих устройствах — двухкаскадная схема центральной части с раздельным заполнением полостей через трубопровод газами с требуемым давлением. Наличие значительного слоя газа между оболочками позволяет симметризовать сжатие газа в центральной полости, реализуя при этом квазиизэнтропический процесс сжатия. В экспериментах №1

и №2 было устройство 1 (рис. 3а) со стальными оболочками, изменялось только наполнение полостей газами. В экспериментах №3 и №4 было устройство 2 (рис. 3б), в котором оболочки первого и второго каскадов двухслойные — сталь, алюминий. Конкретные параметры каждого сферического устройства в четырех представленных экспериментах приведены на рис. 3 и в табл. 1. В табл. 1 приведены начальные давления и плотности газов в полостях, температура среды во время проведения эксперимента и масса ВВ в килограммах тротилового эквивалента (Т.Э.). В качестве ВВ использовался октогеновый состав. Начальная плотность дейтерия рассчитана с использованием справочных данных [16]. Для определения начальной плотности гелия использовали табличные данные [17].

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В каждом эксперименте получено по семь рентгеноснимков в различные моменты времени, относящиеся к разным фазам сжатия полости с газом.

Полученные изображения на рентгеноснимках были обработаны цифровым методом и определены величины эквивалентных радиусов полости с газом в различные моменты времени. На рис. 4–7 для каждого эксперимента представлены все полученные рентгеноснимки с изображением исследуемой газовой полости (темная область в центре кадра). Снимки на рисунках расположены по порядку в соответствии с временами экспозиции. Размеры изображений приведены к одному масштабу.

В табл. 2–5 приведены времена экспозиции рентгеноснимков и полученные в результате обработки изображений соответствующие величины эквивалентных радиусов внутренней (R) границы стальной оболочки, обжимающей газ. Для каждого внутреннего радиуса оболочки приведены погрешности (σ), определенные как среднеквадратичные отклонения границ, полученных методом функциональной трассировки, от соответствующих эквивалентных радиусов.

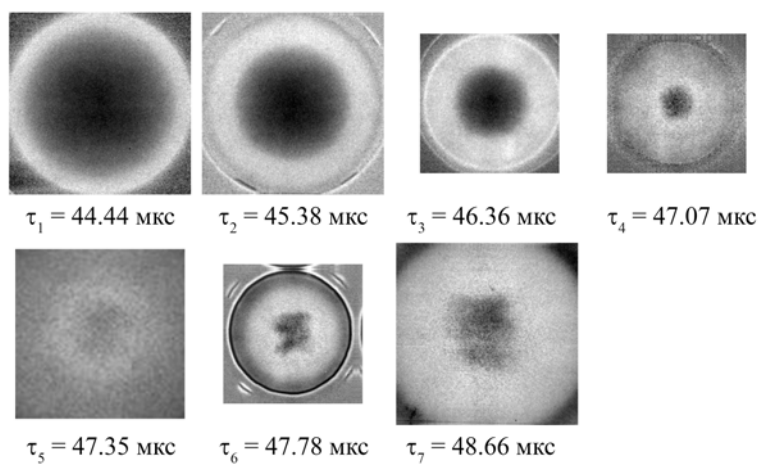
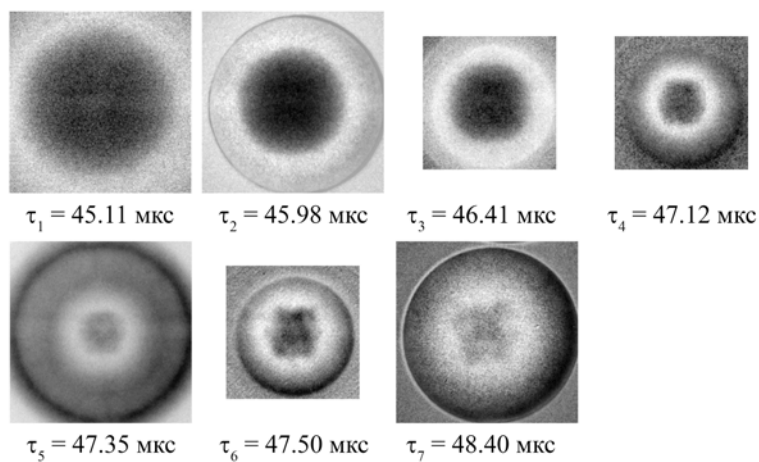
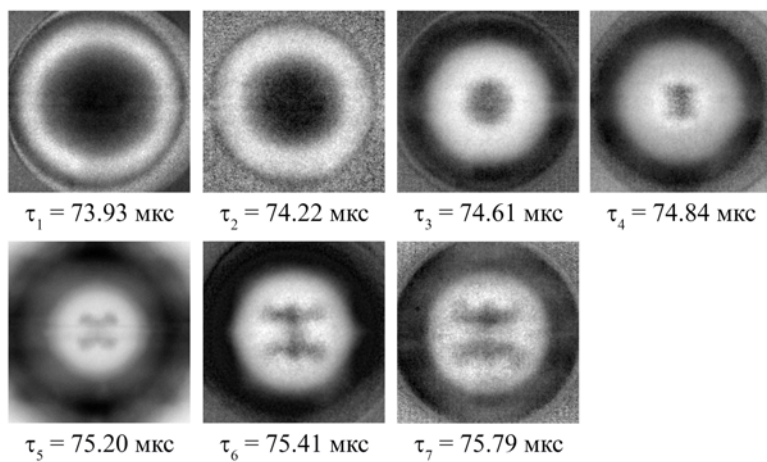


Рис. 4. Рентгено снимки опыта №1 (He)

Рис. 5. Рентгено снимки опыта №2 (D₂)Рис. 6. Рентгено снимки опыта №3 (D₂)

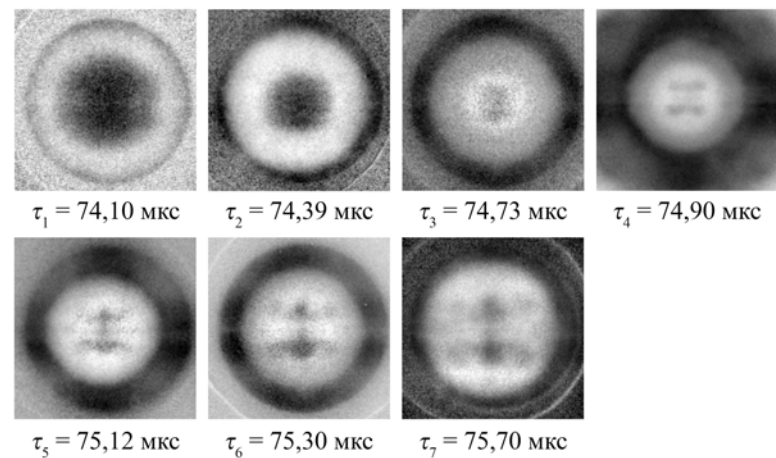


Рис. 7. Рентгеноснимки опыта №4 (He)

Таблица 2. Времена экспозиции, экспериментальные эквивалентные радиусы и соответствующие им погрешности в опыте №1 с гелием

№ п/п	T , мкс	R , мм	σ , мм
1	44.44	30.97	0.25
2	45.38	23.26	0.21
3	46.36	14.12	0.18
4	47.07	7.17	0.27
5	47.35	7.91	0.19
6	47.78	9.03	1.22
7	48.66	11.41	1.03

Таблица 3. Времена экспозиции, экспериментальные эквивалентные радиусы и соответствующие им погрешности в опыте №2 с дейтерием

№ п/п	T , мкс	R , мм	σ , мм
1	45.11	26.08	0.44
2	45.98	19.01	0.27
3	46.41	14.48	0.27
4	47.12	8.83	0.23
5	47.35	9.18	0.35
6	47.80	10.05	0.70
7	48.40	12.04	1.07

Данные, полученные в эксперименте №1 (He), представлены в табл. 2 и на рис. 4, в эксперименте №2 (D₂) — в табл. 3 и на рис. 5, в эксперименте №3 (D₂) — в табл. 4 и на рис. 6 и в эксперименте №4 (He) — в табл. 5 и на рис. 7.

5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Проведено численное моделирование процесса сжатия газа в испытанных устройствах. Расчеты

Таблица 4. Экспериментально определенные эквивалентные радиусы и соответствующие им погрешности в опыте №3 с дейтерием

№ п/п	T , мкс	R , мм	σ , мм
1	73.93	19.45	0.4
2	74.22	14.66	0.3
3	74.61	8.49	0.15
4	74.84	5.68	0.6
5	75.20	6.51	1.6
6	75.41	9.32	2.5
7	75.79	12.01	2.5

Таблица 5. Экспериментально определенные эквивалентные радиусы и соответствующие им погрешности в опыте №4 с гелием

№ п/п	T , мкс	R , мм	σ , мм
1	74.10	14.85	0.35
2	74.39	10.23	0.44
3	74.73	5.92	0.31
4	74.90	6.10	1.41
5	75.12	8.24	2.14
6	75.30	10.29	2.67
7	75.70	13.06	3.71

ты движения оболочек выполнялись по одномерной программе математического комплекса РФЯЦ-ВНИИЭФ [18]. В расчетах для материала оболочек и ВВ использовались аттестованные УРС, введенные в программы математического комплекса. Для материала оболочек Fe, Al использовались УРС в форме РОСА [19]. Динамическая прочность учитывалась по модели [20]. Для расчетов продуктов взрыва применялось УРС из работы [21]. Для дейтерия применялось УРС [22], построенное на основе

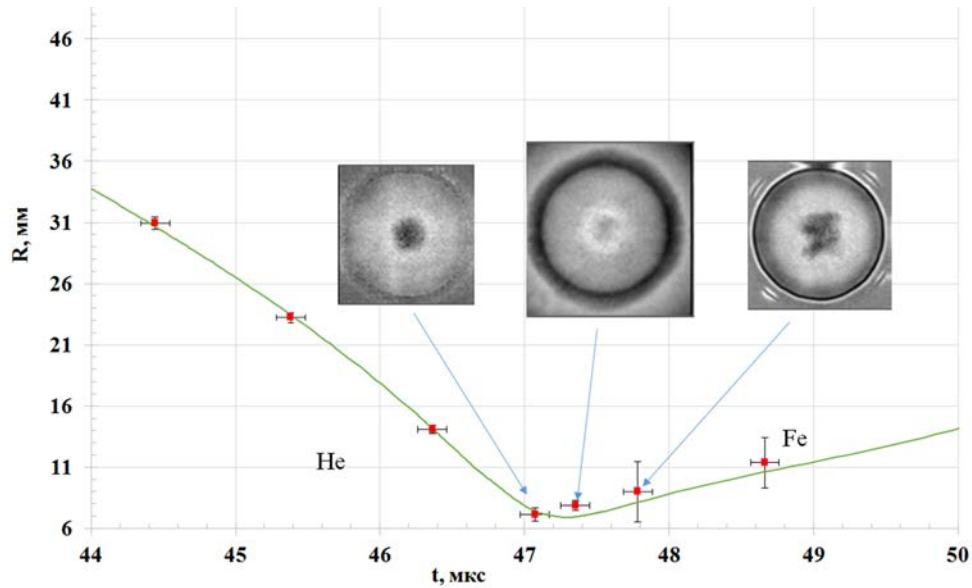


Рис. 8. Сравнение экспериментальных и расчетных результатов для опыта №1 с гелием

модели сжимаемого коволюма (МСК) [23] и калиброванное на экспериментальные данные [4]. Для гелия использовалось УРС в табличной форме, разработанное на основе модифицированной модели сжимаемого коволюма (мМСК).

Основное уравнение мМСК имеет вид

$$P = NkT/(V - V_C) + P_a. \quad (1)$$

Здесь P — давление, V — объем, V_C — коволюм, P_a описывает притяжение частиц, N — число частиц в объеме V , k — постоянная Больцмана.

В работах [22, 23] коволюм V_C считался функцией только давления и отождествлялся с кривой холодного сжатия вещества $V_X(P)$. В модифицированной модели использовались результаты расчетов методом Монте-Карло термодинамических свойств жидкости с обратным степенным потенциалом взаимодействия между частицами, $\varphi(r) = \varepsilon(\sigma/r)^n$, где σ и ε — параметры, имеющие соответственно размерности длины и энергии [24, 25]. «Избыточные» свойства такой жидкости, т. е. представляющие разницу между истинными и идеально-газовыми величинами, зависят от одного параметра $x = \rho^*/T^{*3/n}$, где $\rho^* = N\sigma^{3/V}$, $T^* = kT/\varepsilon$.

При представлении результатов работы [24] в форме (1) коволюм V_C зависит уже не только от давления, но и от температуры. Для $V_C(P, T)$ подобрана аппроксимационная формула, которая при высоких температурах согласуется с известными формулами для второго и третьего вириальных коэффициентов, и $V_C(P, T) \rightarrow V_X(P)$ при $T \rightarrow 0$.

Полагалось, что гелий в жидком состоянии образует частицы четырех сортов: атомы He, ионы He^+ ,

ядра He^{++} и электроны e^- . Два уравнения ионизационного равновесия типа уравнения Саха получены из условия минимума термодинамического потенциала Гиббса. Совместно с двумя соотношениями, отражающими законы сохранения массы и заряда, они составляют систему четырех уравнений относительно четырех концентраций компонентов.

Вклад ионизованных электронов в термодинамические функции вычислялся по формулам для идеального ферми-газа. При вычислении статистических сумм атомов и ионов учитывались только основные состояния. Приблизительно учтено ван-дер-ваальсово притяжение атомов.

Сравнение расчетных и экспериментальных результатов проведено путем сопоставления расчетной траектории движения внутренней границы стальной оболочки, сжимающей исследуемый газ, с экспериментальными точками, соответствующими полученным при обработке рентгено снимков эквивалентным радиусам границ оболочек в моменты рентгенографирования.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

6.1. Опыт №1 с гелием

Сравнение расчетных и экспериментальных результатов для опыта №1 с гелием приведено на рис. 8, где сплошной линией проведена расчетная траектория движения внутренней границы стальной оболочки, обжимающей исследуемый газ. Нанесенные на экспериментальные точки значения погрешностей по радиусам соответствуют величинам 2σ (см. табл. 2), а по времени погрешность состав-

ляет ± 0.1 мкс. Для иллюстрации состояния газовой полости в процессе сжатия на рис. 8 приведены экспериментальные рентгено снимки в моменты, близкие к максимальному сжатию газа (газ — темная область в центре кадра).

На рис. 8 видно, что имеется удовлетворительное согласие результатов эксперимента и расчета. Этот факт позволяет использовать расчетные результаты для определения максимальных средних значений плотности и давления гелия, достигнутых в проведенном эксперименте. При определении средних максимальных величин давления учитывается, что на момент максимального сжатия в газовой полости реализуется профиль этой величины, имеющий значительные колебания по амплитуде. За среднюю величину максимального давления принимается взвешенное значение P_{mean} , которое получается усреднением по массе расчетного профиля давления в момент максимального сжатия и вычисляется по формуле

$$P_{mean} = \frac{\sum_i P_i m_i}{\sum_i m_i}, \quad (2)$$

где индексом « i » обозначены значения величин, вычисленные в i -й счетной точке газовой полости, суммирование проводится по всем счетным точкам в исследуемом газе.

Для оценки разогрева газа на момент максимального сжатия взято средневзвешенное значение температуры T_{mean} , полученное усреднением по массе полученного в расчете профиля температуры аналогичным образом, как для давления P_{mean} .

Исходя из этого, приведем в качестве полученных величин в эксперименте на момент максимального обжатия газа среднее значение плотности ρ_{max} и средневзвешенное по массе давление гелия P_{mean} и температуру T_{mean} .

Анализ результатов расчетов показал, что состояние гелия на момент максимального сжатия характеризуется следующими величинами: радиус полости $r_{min} \approx 7.1$ мм; средняя плотность $\rho_{max} \approx 6.4$ г/см³; средневзвешенное по массе давление гелия $P_{mean} \approx 4.9$ ТПа; степень сжатия $\delta \approx 320$; средневзвешенная температура гелия

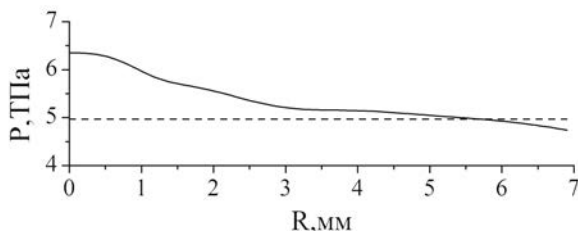


Рис. 9. Распределение давления по радиусу области сжатого гелия в момент максимального сжатия в опыте №1

$T_{mean} \approx 98770$ К. Минимальный радиус газовой полости, зарегистрированный экспериментально, $r_{min.exp} \approx 7.17$ мм. Этому радиусу соответствует средняя плотность гелия $\rho \approx 6.2$ г/см³.

Расчетное распределение давления по радиусу области сжатого гелия на момент максимального сжатия приведено на рис. 9. Штриховая линия — средневзвешенное по массе давление P_{mean} .

Расчетное распределение температуры по радиусу области сжатого гелия на момент максимального сжатия приведено на рис. 10. Штриховая линия — средневзвешенная по массе температура гелия T_{mean} .

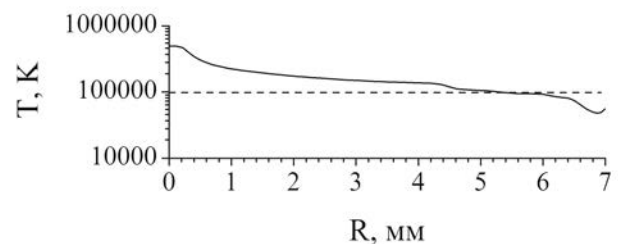


Рис. 10. Распределение температуры по радиусу области сжатого гелия в момент максимального сжатия в опыте №1

6.2. Опыт №2 с дейтерием

Сравнение экспериментальных результатов с результатом численного моделирования процесса сжатия дейтерия дано на рис. 11, где приведены экспериментальные точки, расчетная R - t -диаграмма движения внутренней границы стальной оболочки и экспериментальные рентгено снимки на моменты, близкие к максимальному сжатию. Нанесенные на экспериментальные точки значения погрешностей по радиусам соответствуют величинам 2σ (табл. 3), а по времени погрешность ± 0.1 мкс.

Из данных на рис. 11 следует, что получено удовлетворительное согласие результатов проведенного эксперимента и расчета, что также, как и в опыте №1 с гелием, позволяет использовать расчетные результаты для определения максимальных средних значений плотности и давления дейтерия в этом опыте.

По результатам расчетов получено, что состояние дейтерия на момент максимального сжатия в данном опыте характеризуется следующими величинами: радиус полости $r_{min} \approx 8.87$ мм; средняя плотность $\rho_{max} \approx 6.0$ г/см³; средневзвешенное по массе давление дейтерия $P_{mean} \approx 3.4$ ТПа; степень сжатия $\delta \approx 162$; средневзвешенная температура дейтерия $T_{mean} \approx 20215$ К. Минимальный радиус газовой полости, зарегистрированный в эксперимен-

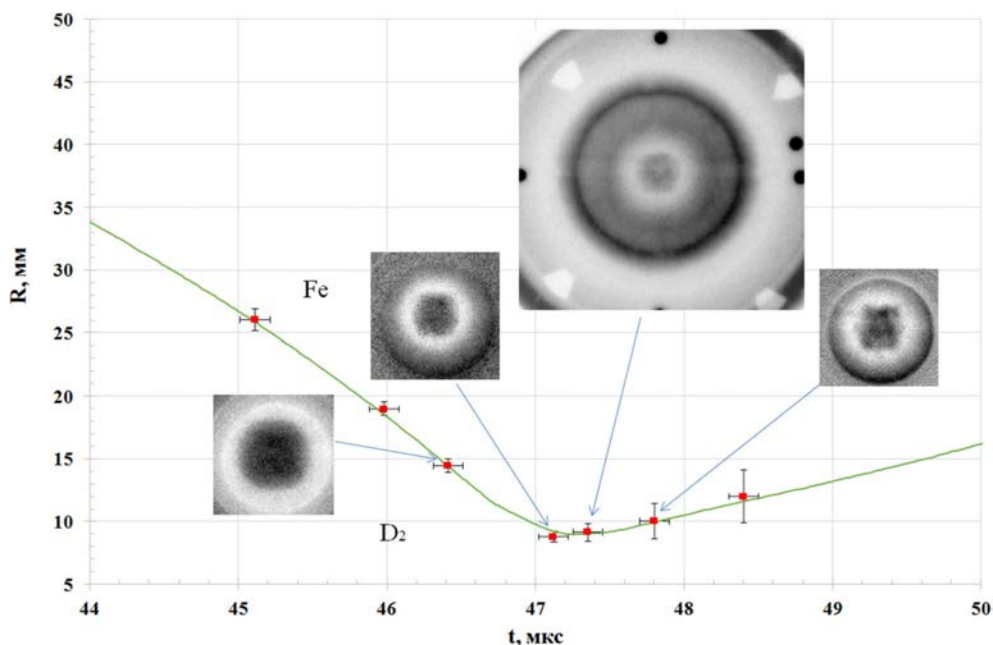


Рис. 11. Сравнение экспериментальных данных с результатами одномерного расчета для опыта №2 с дейтерием

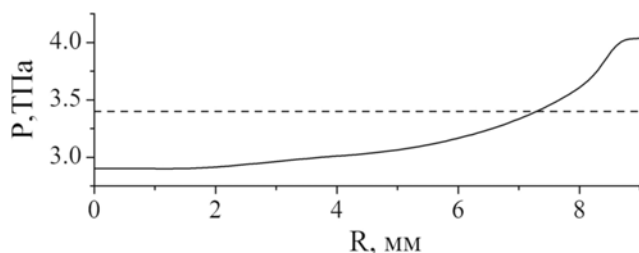


Рис. 12. Распределение давления по радиусу области дейтерия в момент максимального сжатия в опыте №2

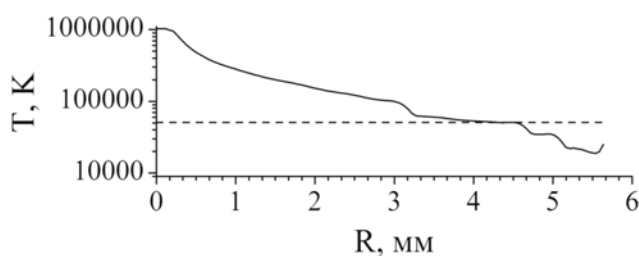


Рис. 13. Распределение температуры по радиусу области сжатого дейтерия в момент максимального сжатия в опыте №2

те, $r_{min.exp} \approx 8.83$ мм. Этому радиусу соответствует средняя плотность дейтерия $\rho \approx 6.0$ г/см³.

Распределение давления по радиусу области сжатого дейтерия в момент максимального сжатия приведено на рис.12. Штриховая линия — средневзвешенное по массе давление P_{mean} .

Расчетное распределение температуры по радиусу области сжатого дейтерия на момент максимального сжатия приведено на рис.13. Штриховая линия — средневзвешенная по массе температура дейтерия T_{mean} .

6.3. Опыт №3 с дейтерием

Сравнение экспериментальных и расчетных результатов при численном моделировании процесса сжатия дейтерия в проведенном эксперименте показано на рис.14. На нем приведены экспериментальные точки, расчетная R - t -диаграмма движения внутренней границы стальной оболочки и, для иллюстрации, экспериментальные рентгено снимки на моменты, близкие к максимальному сжатию. Нанесенные на экспериментальные точки значения погрешностей по радиусам соответствуют величинам 2σ (табл.3), а по времени погрешность составляет ± 0.1 мкс.

Из данных на рис.14 следует удовлетворительное согласие результатов проведенного эксперимента и расчета.

Анализ результатов расчетов показал, что состояния дейтерия на момент максимального сжатия в опыте характеризуются следующими величинами: радиус полости $r_{min} \approx 5.6$ мм; средняя плотность $\rho_{max} \approx 11.4$ г/см³; средневзвешенное по массе давление дейтерия $P_{mean} \approx 13.3$ ТПа; степень сжатия $\delta \approx 520$; средневзвешенная температура дейтерия $T_{mean} \approx 50950$ К. Минимальный радиус га-

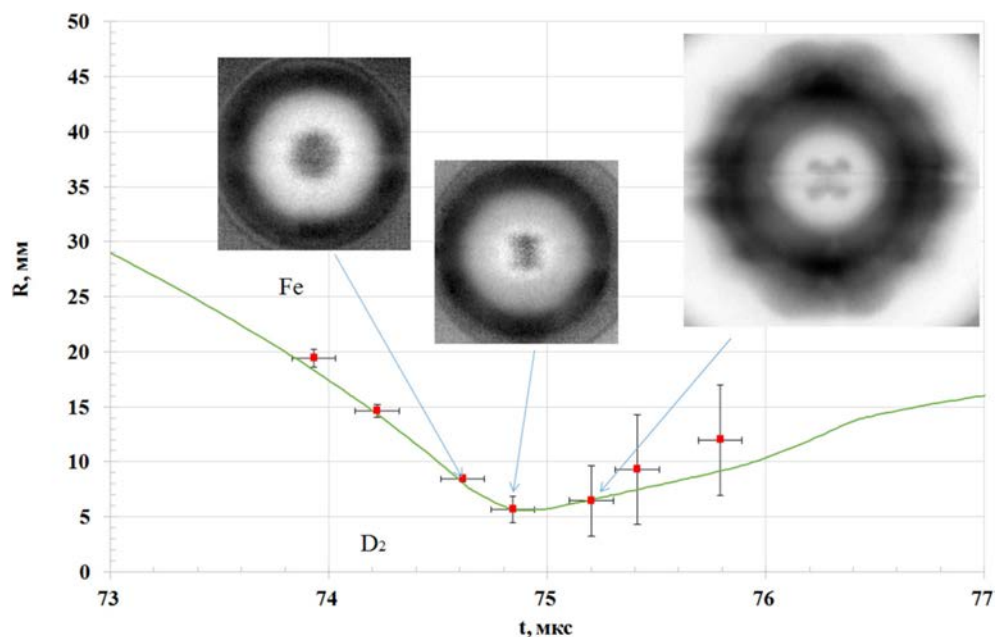


Рис. 14. Сравнение экспериментальных данных с результатами одномерного расчета для опыта №3 с дейтерием

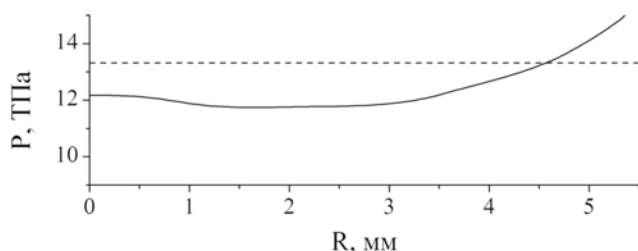


Рис. 15. Распределение давления по радиусу области дейтерия в момент максимального сжатия в опыте №3

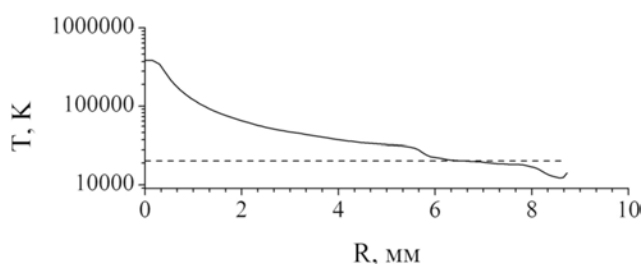


Рис. 16. Распределение температуры по радиусу области сжатого дейтерия в момент максимального сжатия в опыте №3

зовой полости, зарегистрированный в эксперименте, $r_{\min.\text{exp}} \approx 5.68$ мм. Этому радиусу соответствует средняя плотность дейтерия $\rho \approx 10.9$ г/см³.

Распределение давления по радиусу области сжатого дейтерия в момент максимального сжатия приведено на рис.15. Штриховая линия — средневзвешенное по массе давление P_{mean} .

Расчетное распределение температуры по радиусу области сжатого дейтерия на момент максимального сжатия приведено на рис. 16. Штриховая линия — средневзвешенная по массе температура дейтерия T_{mean} .

6.4. Опыт №4 с гелием

Сравнение экспериментальных и расчетных результатов при численном моделировании процесса сжатия гелия в проведенном эксперименте показано на рис. 17. Приведены экспериментальные рентгено снимки на моменты, близкие к максимальному сжатию.

Из данных на рис. 17 следует удовлетворительное согласие результатов проведенного эксперимента и расчета. Анализ результатов расчетов показал, что состояния гелия на момент максимального сжатия в опыте характеризуются следующими величинами: радиус полости $r_{\min} \approx 5.8$ мм; средняя плотность $\rho_{\text{max}} \approx 10.3$ г/см³; средневзвешенное по массе давление гелия $P_{\text{mean}} \approx 10.9$ ТПа; степень сжатия $\delta \approx 470$; средневзвешенная температура гелия $T_{\text{mean}} \approx 133850$ К. Минимальный радиус газовой полости, зарегистрированный в эксперименте, $r_{\min.\text{exp}} \approx 5.9$ мм. Соответствующая средняя плотность дейтерия $\rho \approx 9.8$ г/см³.

Распределение давления по радиусу области сжатого гелия в момент максимального сжатия приведено на рис. 18. Штриховая линия — средневзвешенное по массе давление P_{mean} .

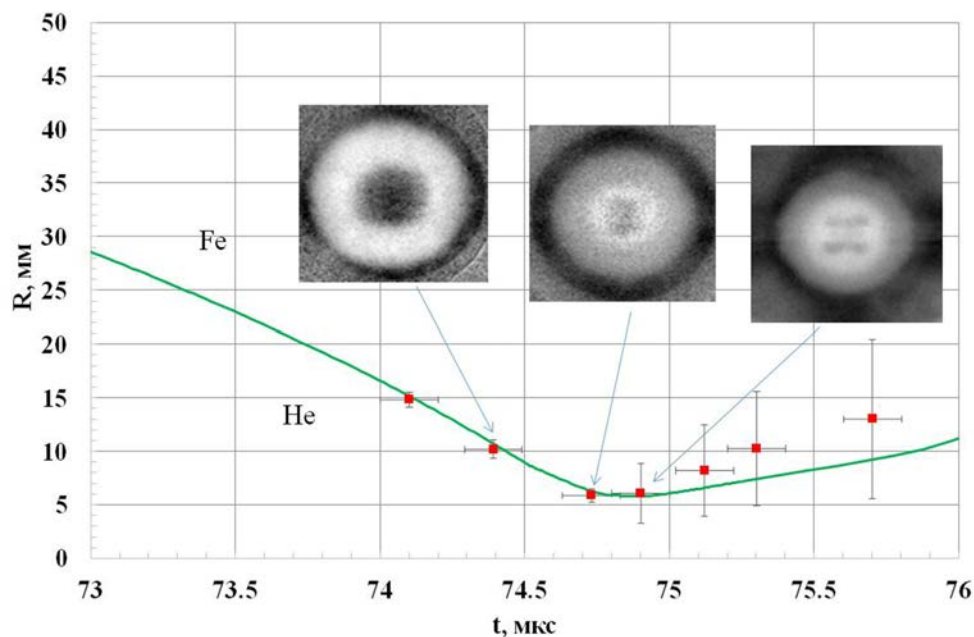


Рис. 17. Сравнение экспериментальных данных с результатами одномерного расчета для опыта №4 с гелием

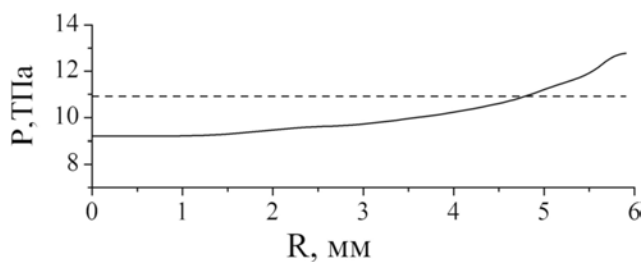


Рис. 18. Распределение давления по радиусу области гелия в момент максимального сжатия в опыте №4

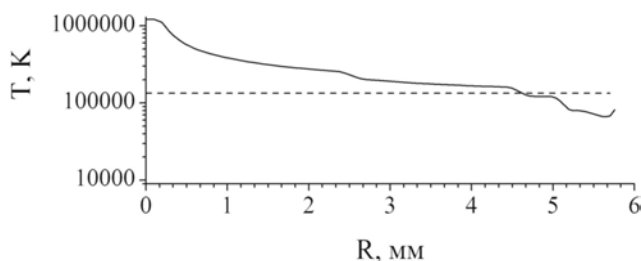


Рис. 19. Распределение температуры по радиусу области сжатого гелия в момент максимального сжатия в опыте №4

Распределение температуры по радиусу области сжатого гелия в момент максимального сжатия приведено на рис. 19. Штриховая линия — средневзвешенная по массе температура T_{mean} .

Эксперименты №3 и №4 проведены с устройством 2 (см. рис. 3) при практически одинаковых начальных условиях по давлению газа в полостях и на-

чальной температуре. Поэтому представляет интерес прямое сравнение полученных экспериментальных данных по сжатию дейтерия и гелия в этих экспериментах. При обработке рентгенограмм получены эквивалентные радиусы не только газовой полости (внутренней границы стальной оболочки второго каскада), но и радиусы наружной границы стальной оболочки второго каскада. Для снимка в центральной проекции получены радиусы границ стальной оболочки первого каскада. Положение наружных границ алюминиевых оболочек не определялось вследствие низкой контрастности изображения на этих границах. Сравнение полученных результатов приведено на рис. 20 в виде экспериментальных точек по положению границ стальных оболочек и расчетных $R-t$ -диаграмм движения внешней и внутренней границ стальных оболочек.

Видно практическое совпадение результатов обоих экспериментов. Можно отметить, что в расчетах удовлетворительно описываются экспериментальные радиусы стальных оболочек обоих каскадов. Таким образом, экспериментально показано, что в области давлений 11–13 ТПа сжимаемость дейтерия и гелия одинакова. Аналогичное совпадение сжатий гелия и дейтерия в других сферических устройствах в области давлений до 20 ТПа отмечено в работе [26].

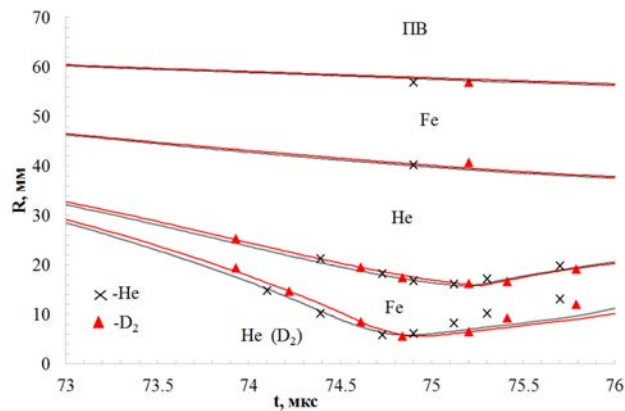


Рис. 20. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и расчетных данных для опыта №3 с дейтерием и опыта №4 с гелием: черная линия — расчет D₂; красная — He

7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На представленных рентгенограммах видно, что вплоть до момента максимального сжатия газов в опытах форма полости (темная область в центре рентгеноснимков) близка к сферической. На стадии расширения асимметрия сжатия резко возрастает, что приводит к увеличению погрешности определения среднего радиуса полости с газом. В опытах №3 и №4 с дейтерием такая асимметрия более заметна, чем в двух первых экспериментах.

Из сопоставления расчетных и экспериментальных данных следует, что вплоть до моментов достижения максимального сжатия полостей с исследуемыми газами имеется удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных.

Необходимо подчеркнуть, что процесс сжатия газа в сферическом взрывном нагружающем устройстве зависит от многих факторов, таких, например, как мощность ВВ, динамические свойства материалов оболочек и т. д., однако, как показывают расчеты, основным фактором, определяющим величину минимального радиуса полости с газом, являются именно свойства исследуемого газа.

Для иллюстрации этого положения в предыдущей нашей работе [11] были приведены зависимости радиусов полостей с газом в процессе сжатия, полученные в трех расчетах, в которых для газа использовались УРС в форме «идеального газа», позволяющие легко изменять «жесткость» УРС путем варьирования только одного параметра γ . Использовались значения $\gamma = 1.7, 1.8, 1.9$.

Путем использования различных УРС идеального газа убедительно показано, что расчетная траектория границы полости с газом чувствительна к сравнительно небольшим изменениям УРС газа. Из-

менение параметра γ на ± 0.1 приводит к изменению минимального радиуса полости на ± 1.1 мм при экспериментальной погрешности определения радиуса в ± 0.8 мм (2σ). При варьировании в расчетах УРС материала обжимающей газ оболочки (в разумных пределах) не удалось заметным образом изменить траекторию границы полости.

Поэтому, получив согласие расчетных и экспериментальных данных в проведенных экспериментах, можно сделать вывод о том, что применение УРС дейтерия (МСК) и гелия (мМСК) позволяет адекватно описывать сжатие этих газов в рассмотренной области давлений.

Таблица 6. Реализованные в экспериментах состояния газа на момент максимального сжатия

№ опыта	газ	$\rho_{max},$ г/см ³	$P_{mean},$ ТПа	$T_{mean},$ К
1	He	6.4	4.9	98770
2	D ₂	6.0	3.4	20215
3	D ₂	11.4	13.3	50950
4	He	10.3	10.9	118500

В настоящей статье представлены результаты четырех экспериментов по обжатию газов гелия и дейтерия в терапаскальной области давлений. Достигнутые давления и плотности в каждом из экспериментов представлены в табл. 6.

Сравним полученные значения средневзвешенных давлений и температур в момент максимального сжатия газа с данными расчета давлений и температур при изэнтропическом сжатии для УРС дейтерия (МСК) и гелия (мМСК). Для данных УРС были рассчитаны изэнтропы для начальных состояний, которые реализуются на фронте первой ударной волны (УВ) при ее схождении к центру. При расчете изэнтроп было учтено, что начальные состояния на первой УВ на разных радиусах в исследуемом газе различаются и по мере уменьшения радиуса давление на фронте нарастает. При анализе оказалось, что на изэнтропах сжатия, проведенных из начальных состояний на УВ в основной массе (более 70%) газа¹⁾, давления и температуры для полученных плотностей ρ_{max} близки к средневзвешенным. Иллюстрация полученного результата приведена на рис. 21, 22, где приведены расчетные изэнтропы P – ρ и T – ρ для УРС гелия (мМСК) из начальных состояний $P \approx 0.5$ ГПа, $\rho \approx 0.07$ г/см³

¹⁾ Эта масса расположена на расстоянии, большем $R_0 \cdot 2/3$, где R_0 — начальный радиус газа во внутреннем каскаде до сжатия. Давление на фронте УВ от 0.5 до 1.5 ГПа.

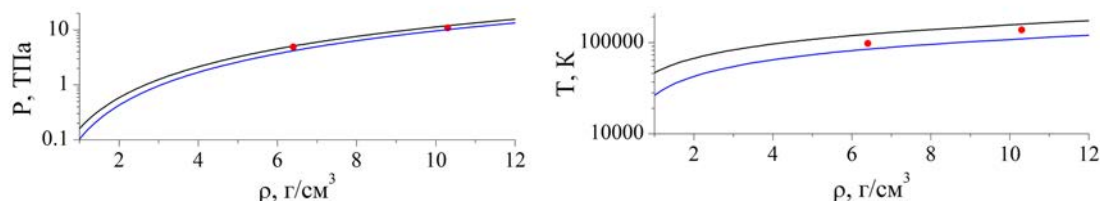


Рис. 21. (В цвете онлайн) Изэнтропы сжатия P - ρ и T - ρ для гелия и экспериментальные средневзвешенные величины P_{mean} , T_{mean}

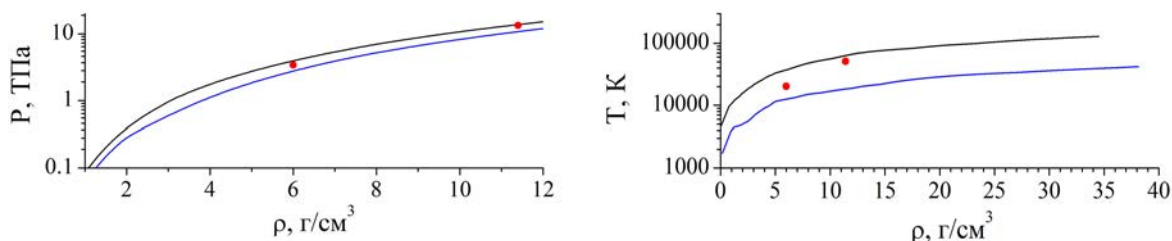


Рис. 22. (В цвете онлайн) Изэнтропы сжатия P - ρ и T - ρ для дейтерия и экспериментальные средневзвешенные величины P_{mean} , T_{mean}

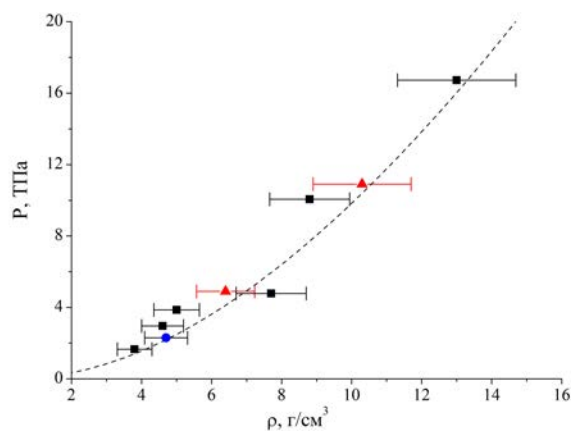


Рис. 23. Экспериментальные данные по сжатию газообразного гелия в сферических нагружающих устройствах: штриховая линия — расчетная изэнтропа по УРС мМСК; квадраты — [12, 26–28]; кружок — [11]; треугольники — настоящая работа

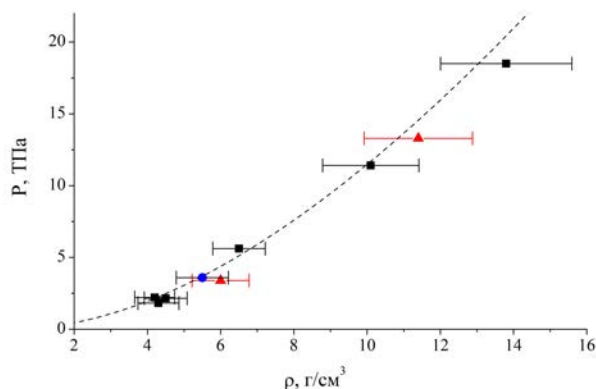


Рис. 24. Экспериментальные данные по сжатию газообразного дейтерия в сферических нагружающих устройствах: линия — расчетная изэнтропа по УРС МСК; квадраты — данные работ [12, 26–28]; кружок — [11]; треугольники — настоящая работа

(синяя линия), $P \approx 1.1$ ГПа, $\rho \approx 0.08$ г/см³ (черная линия) и для УРС дейтерия (МСК) из состояний $P \approx 0.47$ ГПа, $\rho \approx 0.068$ г/см³ (синяя линия), $P \approx 1.2$ ГПа, $\rho \approx 0.1$ г/см³ (черная линия). Красные точки — экспериментальные средневзвешенные величины P_{mean} , T_{mean} (см. табл. 6).

На рис. 21, 22 видно, что экспериментальные средневзвешенные величины P_{mean} , T_{mean} близки к соответствующим значениям на изэнтропах.

Рассмотрим, как соотносятся результаты представленных четырех экспериментов с полученными

в других подобных экспериментах со сферическими устройствами по обжатию гелия и дейтерия. Совокупность имевшихся ранее и вновь полученных результатов по квазиизэнтропическому сжатию гелия и дейтерия в сферических конструкциях приведена на рис. 23 и 24 в координатах P - ρ . Для экспериментальных точек взяты максимальные значения средневзвешенного по массе давления P_{mean} и средней плотности ρ_{max} , полученные в расчетах, описывающих эксперименты. Экспериментальные точки, обозначенные треугольниками, относят-

ся к данным, представленным авторами в настоящей статье; кружки — из [11]; квадраты — экспериментальные данные, полученные также в РФЯЦ-ВНИИЭФ [12, 26–28] на других сферических устройствах. Погрешности, указанные для точек на графиках, взяты одинаковыми и составляют $\pm 13\%(2\sigma)$ по плотности. В каждом эксперименте даже для отдельных точек конкретные величины погрешности по плотности могут отличаться от принятого нами значения (к тому же не всегда указаны в статьях), но в целом отклонение не велико. По давлению погрешность не определялась в силу использования одного способа расчета. Для того чтобы проиллюстрировать положение экспериментальных точек относительно изэнтропического сжатия исследуемого газа в координатах P – ρ , на рис. 23 и 24 штриховыми линиями показаны расчетные изэнтропы сжатия по УРС, проведенные из состояний на первой сходящейся УВ на радиусе $R_0 \cdot 2/3$ в исследуемом газе (D_2 или 4He).

На рис. 23, 24 видно, что в целом результаты экспериментов лежат вблизи расчетных изэнтроп. Тем не менее есть эксперименты, в которых результаты различаются между собой. Данные отклонения можно объяснить как конструктивными особенностями устройств, так и погрешностью метода при определении границ полостей при наличии асимметрии сжатия.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье приведены новые экспериментальные данные по исследованию квазиизэнтропической сжимаемости газообразных гелия и дейтерия в терапаскальной области давлений, полученные в четырех экспериментах со взрывными сферическими устройствами. Плотность исследуемых газов в процессе обжатия определялась рентгенографическим методом по положению границ стальных оболочек, сжимающих газ. Эксперименты моделировались по одномерной газодинамической программе, в которой для изучаемых газов использовались следующие УРС: модель сжимаемого коволюма (МСК) для дейтерия и модифицированная модель сжимаемого коволюма (мМСК) для гелия. Выбранная модель расчетов позволила удовлетворительно описать сжатия газовой полости во всех экспериментах в одной манере. Представленные в работе максимальные плотности, давления и температуры определены из этих расчетов.

Экспериментально получено, что в области давлений 11–13 ТПа сжатия дейтерия и гелия в одинаковых устройствах совпадают, что подтверждает по-

лученное ранее аналогичное заключение [26] о совпадении сжатий гелия и дейтерия в других сферических устройствах в области давлений до 20 ТПа.

Показано, что полученные экспериментальные результаты согласуются с данными по квазиизэнтропической сжимаемости дейтерия и гелия, представленными в других работах. Отмеченные факты повышают уверенность в достоверности достигнутых параметров сжатия.

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: Р. В. Борисову, Е. П. Волкову, С. Е. Елфимову, С. Ю. Согрину, Д. П. Турутину, А. В. Бучирину, Р. В. Тилькунову, А. С. Соколовой, А. И. Гуркину, Е. В. Шевнину, И. П. Максимкину, А. И. Ломайкину. Также авторы благодарят М. А. Мочалова за предоставление данных о результатах аналогичных экспериментов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (в рамках соглашения с ОИВТ РАН №075-15-2020-785).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Ebeling, A. Forster, V. Fortov et al., *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*, Teubner, Stuttgart-Leipzig (1991).
2. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит Москва, (2013).
3. V. E. Fortov, *Extreme States of Matter on Earth and in the Cosmos*, Springer-Verlag, Berlin (2011).
4. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова и др., Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972).
5. Р. Ф. Трунин, Г. В. Борисков, А. И. Быков и др., ЖЭТФ **76**, 90 (2006).
6. С. К. Гришечкин, С. К. Груздев, В. К. Грязнов и др., Письма в ЖЭТФ **80**, 452 (2004).
7. М. А. Мочалов, Диссертация на соискание степени доктора физ. мат. наук, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (2008).
8. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **151**, 592 (2017).
9. Г. В. Борисков, А. И. Быков, Н. И. Егоров, М. В. Жерноклетов и др., ЖЭТФ **157**, 221 (2020).
10. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 336 (2010).

11. М. В. Жерноклетов, В. А. Раевский, С. Ф. Маначкин и др., ФГВ **54**(5), 3 (2018).
12. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, и др., Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
13. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov, and A. A. Volkov, in *The 11th IEEE Pulsed Power Conference, Digest of the Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein, and I. Vikovitsky, Vol. 2, p. 1663 (1997).
14. В. Ф. Басманов, В. С. Гордеев, А. В. Гришин и др., Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ **20**, 172 (2015).
15. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recognition and Image Analysis **19**, 63 (2009).
16. A. Michels, W. De Graaff, T. Wassenaar et al., Physica **25**, 25 (1959).
17. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, ГСССД, Изд-во стандартов, Москва (1984).
18. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, вып. 3, 11 (1982).
19. Б. Л. Глушак, Л. Ф. Гударенко, Ю. М. Стяжкин, ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, вып. 2, 57 (1991).
20. Б. Л. Глушак, О. Н. Игнатова, С. С. Надежин, В. А. Раевский, ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, вып. 2, 25 (2012).
21. В. Н. Зубарев, А. А. Евстигнеев, ФГВ **20**, 114 (1984).
22. В. П. Копышев, В. В. Хрусталева, ПМТФ **21**, 122 (1980).
23. В. П. Копышев, ПМТФ **12**, 119 (1971).
24. W. G. Hoover, M. Ross, K. W. Johnson, et al., J. Chem. Phys. **52**, 4931 (1970).
25. W. G. Hoover, S. G. Gray, and K. W. Johnson, J. Chem. Phys. **55**, 1128 (1971).
26. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др. ЖЭТФ **160**, 735 (2021).
27. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др. ЖЭТФ **152**, 1113, (2017).
28. S. I. Blinnikov, R. I. Ilkaev, M. A. Mochalov et al., Phys. Rev. E **99**, 033102 (2019).

УДАРНО-ВОЛНОВОЕ СЖАТИЕ АЗОТНОГО ФЛЮИДА В ДИАПАЗОНЕ ДАВЛЕНИЙ 140–250 ГПа

М. В. Жерноклетов^a, **А. Е. Ковалев**^a, **М. Г. Новиков**^{a,c*}, **В. К. Грязнов**^b,

И. Л. Иосилевский^{d,e}, **А. В. Шутков**^b

^a Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия

^b Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^c Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева
603950, Нижний Новгород, Россия

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

^e Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 7 сентября 2022 г.,
после переработки 28 сентября 2022 г.
Принята к публикации 28 сентября 2022 г.

Обсуждаются результаты серии опытов по ударному сжатию плотного азотного флюида, предварительно статически сжатого до начальной плотности $\rho = 0.8, 0.65, 0.5$ г/см³, до давлений 140–230 ГПа на генераторах ударных волн полусферической геометрии. Эксперименты проведены в продолжение и развитие предыдущей серии опытов, также выполненных во ВНИИЭФ (Саров) в 2008–2010 гг., по ударному сжатию жидкого азота до давлений 100–330 ГПа. Целью настоящих экспериментов была проверка и подтверждение выявленной ранее величины предельного сжатия азота до предела, близкого к идеально-газовому, $\rho_0/\rho \approx 4.2$, и примечательного последующего квазиизохорического хода ударной адиабаты в указанном интервале давлений 100–330 ГПа. Полученные экспериментальные данные сравниваются с результатами теоретических расчетов, использующих различные модели уравнения состояния неидеальной азотной плазмы.

DOI: 10.31857/S0044451023020128

EDN: OQXJCL

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к физическим свойствам сжатого и разогретого азота связан прежде всего со значительным присутствием азота в природе, в том числе в земной атмосфере, в планетах-гигантах солнечной системы и в так называемых экзопланетах (внесолнечных планетах) [1]. Он связан также и с техническими применениями как самого азота, так и его соединений в качестве сверхтвёрдых и тугоплав-

ких материалов и, кроме того, в качестве одного из основных компонентов бризантных конденсированных взрывчатых веществ. Наконец, с плотным горячим азотом также связана интригующая идея прикладного использования метастабильного состояния полимерного азота в качестве гипотетического высококалорийного топлива для широкого круга приложений [2, 3].

Как известно, молекулярный азот характеризуется высокой энергией диссоциации молекулы N₂ ($D_{N_2} = 9.76$ эВ), близкой к энергии ионизации атома ($I_N = 14.5$ эВ), в отличие от водорода, где две соответствующие энергии различаются гораздо больше ($D_{H_2} = 4.48$, $I_H = 13.6$ эВ). Это делает азотную систему весьма устойчивой к внешним динамиче-

* E-mail: mephodynam@yandex.ru

ским воздействиям и, в частности, к интенсивным ударным и изоэнтропическим воздействиям. Гораздо важнее главное структурное отличие азота, связанное с наличием у него трех электронов, способных формировать ковалентные связи, что дает азоту возможность создавать богатую (в сравнении с водородом) номенклатуру связанных структур помимо простой бинарной молекулы N_2 и, в частности, создавать многоатомные фрагменты «полимерных» структур, реализующихся как в твердой, так и во флюидной фазах плотного и сверхплотного азота. Последнее особенно важно для реализации и интерпретации результатов динамических экспериментов с интенсивным многократным сжатием азота.

Термодинамические параметры ударного сжатия жидкого азота неоднократно измерялись экспериментально с достижением все более и более высокого уровня давлений сжатия [4–11]. В частности, в последних экспериментах ВНИИЭФ [10, 11] был достигнут максимальный уровень давлений ударного сжатия, $P \approx 350$ ГПа, в области давлений 100–130 ГПа было зафиксировано сжатие азота до степени сжатия $\sigma \approx 4.2$, близкой к идеально-газовой ($\sigma_{i.g.} \approx 4$). Кроме того, в экспериментах [10, 11] было зафиксировано, что при давлении $P \approx 100$ ГПа зависимость $P(\rho)$ на ударной адиабате резко меняет характер своего изменения и при более высоких давлениях ($100 \text{ ГПа} \leq P \leq 330 \text{ ГПа}$) демонстрирует примечательный практически изохорный характер, существенно отличный как от результатов ударного сжатия при более низких давлениях [11], так и от хода ударной адиабаты, предсказанной в модельных расчетах с использованием УРС OPAL [12]. Кроме того, в экспериментах [11] была зафиксирована примечательная линейность экспериментально измеренной зависимости температуры ударно-сжатой плазмы азота от давления, $T(P)$.

Указанные результаты экспериментов [10, 11] ставят два актуальных вопроса.

1) Какой физический механизм отвечает за резкий излом хода ударной адиабаты жидкого азота $P(\rho)$ с пологого на квазиизохорический в районе $P \approx 1$ Мбар, $\rho \approx 3.3 \text{ г/см}^3$ и $T \approx 10\text{--}20 \text{ К}$?

2) Какой физический механизм отвечает за саму квазиизохоричность участка ударной адиабаты в интервале $P \approx 1\text{--}3.5$ Мбар?

Одной из главных целей настоящих экспериментов являлась проверка и ожидаемое подтверждение или же коррекция указанной изохорности ударной адиабаты с начальной плотностью $\rho_0 \approx 0.8 \text{ г/см}^3$.

Второй, сопутствующей первой, целью опытов является проверка зафиксированной в эксперимен-

тах [11] линейной связи экспериментально измеренных температуры и давления в том же интервале давлений $P \approx 1\text{--}3.5$ Мбар (при $T \approx 15\text{--}55 \text{ К}$).

Наконец, третьей важной целью является расширение совокупности параметров, достигаемых при ударном сжатии, за счет изменения начальной плотности сжимаемого азотного флюида. Это важно для поиска возможных особенностей ударного сжатия азота в более широкой области параметров, нежели это позволяли эксперименты [10, 11] со сжатием изначально жидкого азота.

Если обратиться к вопросам физики процессов, реализующихся при интенсивном ударном сжатии азота, то наиболее ярким и удивительным феноменом, зафиксированным уже достаточно давно еще в пионерских экспериментах [6–8], является «ударное охлаждение» плотного азотного флюида. В этих экспериментах при сжатии азота падающей ударной волной до давлений $P = 30\text{--}40$ ГПа (и $T = 8\text{--}10 \text{ К}$), температура за волной, отраженной от оптических окон (Al_2O_3 , LiF) и сжимающей азот до давлений $P \sim 1$ Мбар, оказалась заметно ниже, чем за падающей волной, что не запрещено законами термодинамики, но крайне необычно и требует объяснений.

Среди попыток такого объяснения этого эффекта очень важными были предположения о существовании в плотном азотном флюиде в этом диапазоне параметров обширной зоны с более общей аномалией — отрицательностью (обычно положительного) термодинамического параметра Грюнайзена $Gr = V(\partial P / \partial E)_V$ [13]. Детальный анализ проблемы отрицательности параметра Грюнайзена в результатах ударно-волновых экспериментов содержится в работах [14–18]. В частности, в работе [15] подчеркивается, что причины возможного отрицательного эффективного коэффициента Грюнайзена могут быть связаны с размытыми фазовыми превращениями. Так, в свою очередь, указанная отрицательность параметра Грюнайзена в экспериментах [6, 8] была интерпретирована как доказательство достижения в ударной волне примечательного явления, предсказанного еще в пионерских работах [13, 19], а позже в работе [12] и широко обсуждаемого с тех пор возникновения в условиях динамического сжатия обширной зоны гипотетической полимеризации плотного азота — сплошной полимеризации в низкотемпературной твердой фазе [20] и кусочно-фрагментарной полимеризации азота в высокотемпературной флюидной фазе [21, 22]. Важно, что это происходит при температурах и давлениях, соответствующих зоне, достигаемой в настоящем эксперименте и в предыдущих экспериментах [10, 11].

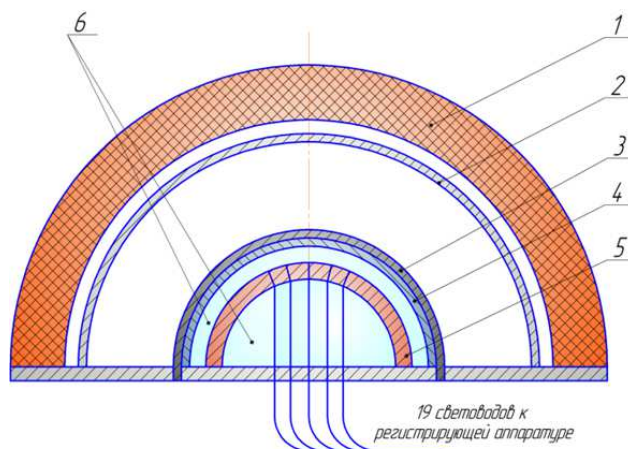


Рис. 1. Схема экспериментального устройства: 1 — заряд ВВ; 2 — ударник (сталь Ст3); 3 — внешний экран (сталь ХН35ВТЮ-ВД); 4 — внутренний экран (АД1); 5 — латунная обойма; 6 — исследуемый газ (N_2)

Предсказания конкретных параметров зоны существования в плотном азотном флюиде особой «полимерной» фазы с заметной долей полимерных фрагментов были в значительной мере гипотетическими и достаточно неопределенными. Общим для этих работ было предсказание существования некоей гипотетической границы фазового перехода первого рода, разделяющей область существования обычной молекулярной фазы (N_2) и полимерной фазы. Главным, с точки зрения термодинамики, в работе [12] было предсказание в полимерной фазе аномального свойства — отрицательного знака параметра Грюнайзена и связанного с ним коэффициента теплового расширения плотного полимерного азотного флюида.

Более определенными и авторитетными в вопросе о необычном фазовом переходе в плотном азотном флюиде были результаты относительно недавнего прямого численного моделирования в рамках строгого подхода *ab initio*, реализованного в работах [23–25], где существование необычного фазового перехода флюид–флюид «энтропийного» типа с «падающей» $P(T)$ границей (обсуждение этого термина см. в [17, 18]) было предсказано при относительно низких температурах, соответствующих критической температуре $T_c \approx 4000$ К, достаточно далекой от параметров, достигаемых при ударном сжатии жидкого азота. В работах [17, 18] подчеркивалось, что помимо самого «энтропийного» фазового перехода [23, 24] не менее важной является всегда сопутствующая ему зона аномальной термодинамики (АТР), как бы продолжающая, но уже безразрывно, границу самого фазового перехода в область более высоких температур и плотностей. Именно эта «сопряженная» фазовому переходу зона АТР может быть вполне достижима при ударном сжатии

в ударно-волновых экспериментах ВНИИЭФ, что и подтвердилось позже в работе [24].

Таким образом, настоящие эксперименты дают возможность прямого сравнения результатов эксперимента реального с результатами «эксперимента численного» [23, 24], активно развиваемого в последние десятилетия. Важность такого сравнения объясняет необходимость максимального расширения области параметров, где такое сравнение может быть реализовано. Поэтому существенным является возможность широко варьировать начальную плотность азотного флюида (а не жидкого или твердого азота), максимально раздвигая доступную базу параметров диапазона возможного сравнения результатов эксперимента. Именно с этой целью в настоящей работе проведена серия экспериментов по ударному сжатию в диапазоне давлений 140–250 ГПа азотного флюида, предварительно статически сжатого до плотности $\rho = 0.8, 0.65, 0.5$ г/см³. Все полученные экспериментальные результаты сравниваются с результатами теоретических расчетов, использующих различные модели уравнения состояния неидеальной азотной плазмы.

2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

В экспериментах с азотным флюидом высокой начальной плотности использовалась полусферическая камера, адаптированная к использованию в сочетании с полусферическими генераторами ударных волн, разработанными во ВНИИЭФ [10, 11]. Постановка опытов схематически показана на рис. 1.

После инициирования заряда взрывчатого вещества (ВВ) 1 его продукты детонации через воздушный зазор разгоняют стальную оболочку 2. При уда-

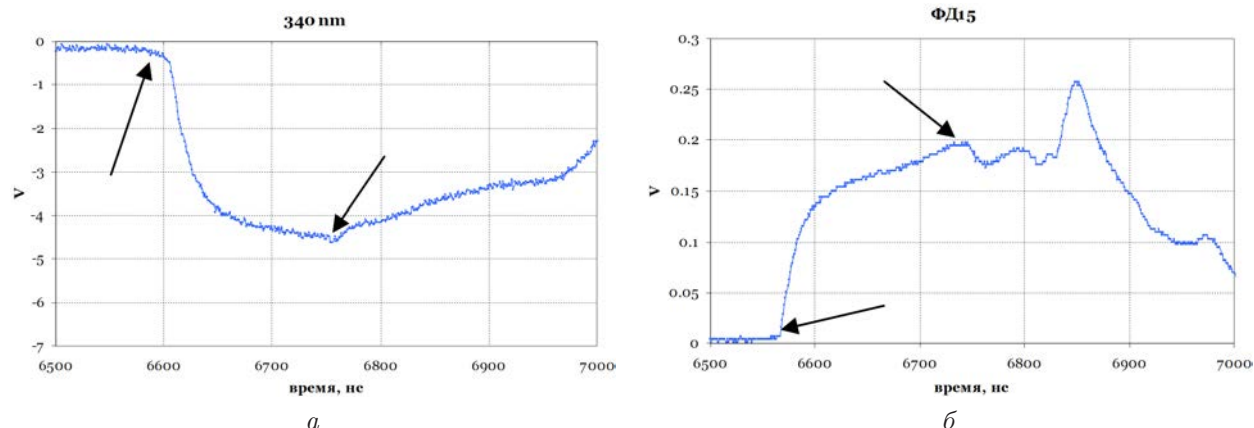


Рис. 2. Осциллограммы свечения фронта ударной волны в азотном флюиде в эксперименте при давлении 230 ГПа: *а* — сигнал фотомножителя на длине волны 340 нм; *б* — сигнал фотодиода

ре оболочки по внешнему экрану 3 в нем возникает ударная волна, которая последовательно переходит во внутренний алюминиевый экран 4 и далее в исследуемый газ 6. Полость, образованная между оболочкой и внешним экраном, изготовленным из прочной стали ХН35ВТЮ-ВД, вакуумировалась. Для передачи светового потока с фронта ударной волны в латунной обойме 5 заподлицо закреплялись 19 световодов. Объем 6 заполнялся газообразным азотом из термокомпрессионного источника до давлений около 2700 кгс/см², необходимых для получения начальной плотности примерно 0.8 г/см³.

При регистрации свечения фронта ударной волны использовались преобразователи оптических сигналов видимого спектра излучения, выполненные на фотодиодах ФД256 и фотоэлектронных умножителях со временем нарастания анодного импульса 1.5 нс.

Время движения ударной волны в газе измерялось оптическим методом от момента появления свечения фронта до момента спада амплитуды свечения из-за повреждения торца световода ударной волной. Типичные осциллограммы свечения фронта ударной волны в азотном флюиде в эксперименте при давлении 230 ГПа приведены на рис. 2. Стрелками обозначены моменты выхода ударной волны из алюминиевого экрана в азот и момент прихода ударной волны на торец световода. Яркая температура находилась усреднением сигнала с ФЭУ от момента образования оптически плотного излучающего слоя до отсечки излучения на торце световода.

Особенностью опытов со сферическими генераторами является рост скорости ударной волны в элементах экспериментального устройства при движении волны к центру. Измеренные в экспериментах значения средних скоростей ударных волн имеют смысл лишь для радиусов измерения R_{mes} , находя-

щихся на серединах баз измерения в соответствующих конструкциях [11, 26] (см. рис. 1). Поэтому параметры ударно-сжатого азота находились из законов сохранения на границе распада разрыва, формально перенесенной на радиус измерения скорости ударной волны в азоте R_{mes} , что требует определения состояний в экранах на этом же радиусе.

Для получения аналитических зависимостей изменения скорости ударной волны в элементах конструкции от радиуса, $D(R)$, и определения состояний в экранах на радиусе измерения R_{mes} использовались приведенные в работах [10, 11] параметры и динамические характеристики генератора ударных волн полусферической геометрии и выполнялось компьютерное моделирование экспериментов по одномерной газодинамической программе ВНИИЭФ.

Пересечения изоэнтроп расширения, рассчитанных из состояний в экранах на радиусах измерений R_{mes} , с волновыми лучами для измеренных скоростей ударных волн в азоте, согласно методу отражения, определяют давления и массовые скорости, а из закона сохранения массы находятся плотности ударно-сжатого азота. Параметры ударных волн в газе, в том числе его температура, приведены в таблице. На представленных ниже рис. 3–6 полученные данные сравниваются с результатами расчетов, а также с данными других авторов.

3. ВЫБОР ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ СРАВНИТЕЛЬНЫХ РАСЧЕТОВ ПАРАМЕТРОВ ДИНАМИЧЕСКОГО СЖАТИЯ АЗОТА

Для проведения теоретического анализа результатов экспериментов и их сравнения были выбраны три теоретические модели уравнения состояния

Таблица. Параметры ударно-сжатого азотного флюида

Состояние в экране на радиусе R_{mes}			Состояние в азоте на радиусе R_{mes}					
D , км/с	U , км/с	P , ГПа	R_{mes} , мм	D , км/с	U , км/с	P , ГПа	ρ , г/см ³	T , кК
			$\rho_0(N_2) = 0.808$ г/см ³					
18.76	10.44	531	15.03	19.22 ± 0.32	14.8	229.8 ± 5.4	3.54 ± 0.29	45.90 ± 9.30
			$\rho_0(N_2) = 0.786$ г/см ³					
17.75	9.60	461	15.10	17.55 ± 0.36	13.78	190.0 ± 5.4	3.65 ± 0.37	37.50 ± 5.80
			$\rho_0(N_2) = 0.650$ г/см ³					
17.75	9.60	461	15.00	18.00 ± 0.63	14.6	170.8 ± 8.5	3.44 ± 0.50	29.40 ± 2.75
			$\rho_0(N_2) = 0.510$ г/см ³					
17.75	9.60	461	15.00	18.35 ± 0.60	15.1	141.3 ± 6.0	2.88 ± 0.58	17.20 ± 2.50
			$\rho_0(N_2) = 0.500$ г/см ³					
21.66	13.00	763	14.93	24.9 ± 0.40	19.7	245.0 ± 5.0	2.40 ± 0.20	—

Примечание: D — волновая скорость, U — массовая скорость, P — давление, R_{mes} — радиус измерения, ρ — плотность, T — температура.

(УРС), представляющие три различных подхода.

1) Хорошо известное и широко используемое в прикладных расчетах параметров динамического сжатия «широкодиапазонное» интерполяционное УРС SESAME [27].

2) Традиционный и хорошо зарекомендовавший себя в предыдущих работах [11, 28, 29] «квазихимический» способ описания, реализованный в коде SANA-N из комплекса термодинамических кодов SANA [30, 31].

3) Наиболее строгий, но и наиболее трудоемкий подход *ab initio*, сочетающий строгое описание при низких температурах вклада электронов с достаточно полным учетом квантовых эффектов в рамках теории функционала плотности с учетом при высоких температурах квантовых эффектов в рамках метода «интегралов по траекториям» в сочетании с прямым численным молекулярно-динамическим моделированием (QMD) вклада ионных степеней свободы. Для реализации этой процедуры в настоящей работе были использованы результаты расчета в работах [24, 25].

Основной теоретической моделью, с помощью которой были выполнены расчеты достигнутых параметров состояния ударно-сжатого азота и его термодинамических свойств, как и в предыдущей работе [11], была модель SANA-N. Термодинамическое описание в этой модели построено на основе квазихимического представления (так называемая химическая модель плазмы) [30–32], описывающего азотный флюид как частично ионизован-

ную термодинамически равновесную плазму, состоящую из атомов, молекул N_2 и N_3 , атомных и молекулярных ионов азота (N^+ , N^{++} , N_2^+) и электронов, с сильным кулоновским взаимодействием и интенсивным короткодействующим отталкиванием тяжелых частиц, а также с частичным вырождением электронов. Данная модель, все исходные предположения которой строятся на микроскопическом уровне, успешно применялась для описания ударного сжатия молекулярных газов, в том числе и азота [11, 32, 33]. Для учета эффектов кулоновской неидеальности взаимодействия заряженных частиц использовалось модифицированное псевдопотенциальное приближение [32–34]. Для описания вклада интенсивного отталкивания тяжелых частиц на близких расстояниях (эффекта «собственного объема») в модели кода SANA-N используется приближение «мягких сфер» [35], модифицированное на случай многокомпонентной смеси частиц, различающихся по своим «размерам» [34]. Характеристики короткодействующего отталкивания в парах молекула–молекула, атом–молекула и атом–атом, априори неопределенные, выбирались в соответствии с рекомендациями неэмпирического атом-атомного приближения [36–38]. Как уже отмечалось в работе [11], это приводило к эффекту «диссоциации давлением» за счет «выигрыша» в собственном объеме атомной компоненты по сравнению с молекулярной в процессе диссоциации последней. В настоящей работе в состав молекулярной составляющей, содержащей в работе [11] только двухатом-

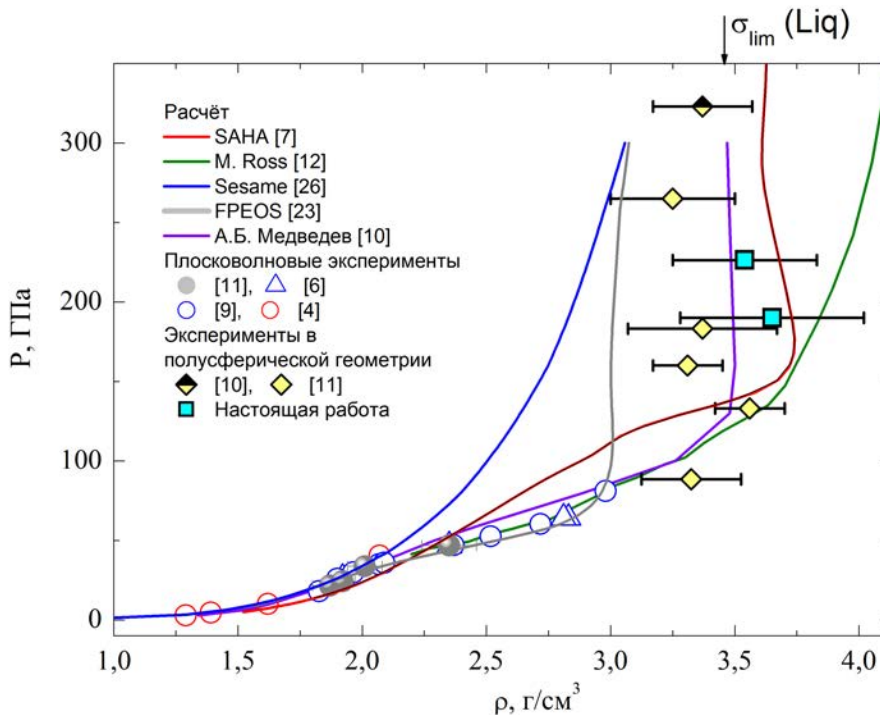


Рис. 3. Зависимость давления от плотности в ударно-сжатом азоте с начальной плотностью $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.8 \text{ г/см}^3$

ные комплексы, была включена молекула N_3 , параметры отталкивания для которой (размер молекулы и «мягкость» отталкивания) выбирались в соответствии с ее структурными данными [4, 39]. Учет вклада молекулы N_3 привел к более высокой сжимаемости неидеальной плазмы азота по сравнению с расчетами [11] при давлениях $P \leq 100 \text{ ГПа}$, что продемонстрировано на рис. 3.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ СРАВНЕНИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Согласно расчетам, проведенным с использованием кода SAHA-N, за фронтом ударной волны в азотном флюиде для экспериментов работ [10, 11] и в настоящей работе реализуются состояния плотной сильно неидеальной ($\Gamma_D = e^2/r_D kT > 1$, $\max \Gamma_D \approx 10$, e — заряд электрона, r_D — дебаевский радиус, k — постоянная Больцмана), частично ионизованной (соотношение концентраций электронов и атомов $n_e/n_a \sim 1$) и частично вырожденной ($\max n_e \lambda_e^3 \sim 3$, λ_e — тепловая длина волны де Бройля для электрона), плазмы азота, где при давлениях около 200 ГПа в составе плазмы присутствует уже заметная доля двукратных ионов азота N^{++} .

Наиболее важными в настоящих экспериментах представляются измерения параметров адиабаты Гюгоньо с начальными плотностями $\rho_0(\text{N}_2) = 0.808 \text{ г/см}^3$ и $\rho_0(\text{N}_2) = 0.786 \text{ г/см}^3$. Рас-

четы показывают, что различие начальных плотностей в этих двух экспериментах незначительно, поэтому обе точки можно считать принадлежащими одной и той же ударной адиабате. Расчеты также показывают, что различие в давлении и энтальпии исходного сжатого азотного флюида в настоящем эксперименте мало отличается от давления и энтальпии исходного жидкого состояния азота, служившего начальным состоянием в прежней серии экспериментов ВНИИЭФ [10, 11]. Таким образом, обе обсуждаемые точки настоящих экспериментов законно считать принадлежащими одной и той же ударной адиабате, которая измерялась в работах [10, 11], поэтому сравнение результатов настоящего и предыдущих экспериментов представлено совместно на рис. 3.

Главный вывод, который позволяет сделать приведенное на рис. 3 сравнение, состоит в том, что результаты настоящего эксперимента со сжатием азотного флюида с $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.8 \text{ г/см}^3$ находятся в хорошем согласии с результатами экспериментов [10, 11] по сжатию жидкого азота ($T_0 \approx 77 \text{ К}$) и подтверждают (и усиливают) отмечавшийся ранее почти изохорический характер («свечу») этой адиабаты Гюгоньо с $\rho \approx 3.3 \text{ г/см}^3$ в диапазоне давлений $90 \text{ ГПа} < P < 330 \text{ ГПа}$.

Как уже подчеркивалось ранее [40, 41], изохоричность адиабаты Гюгоньо в этом диапазоне высоких давлений (где $P/P_0 \gg 1$) означает фактическое постоянство параметра Грюнаизена $Gr \equiv V(\partial P/\partial E)_V$,

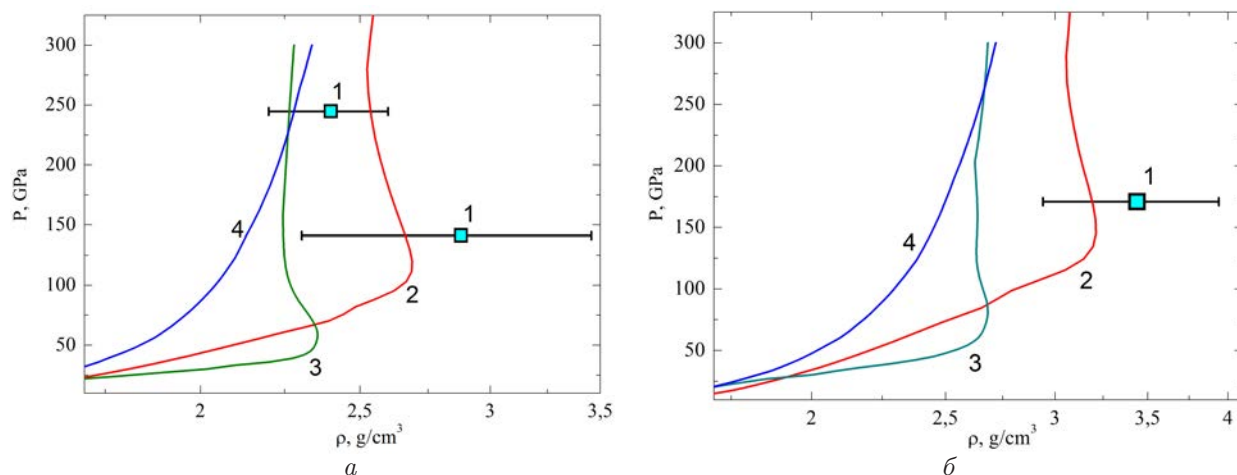


Рис. 4. Зависимости давления от плотности в ударно-сжатом азоте с пониженной начальной плотностью: а — $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.51 \text{ г/см}^3$; б — $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.65 \text{ г/см}^3$; 1 — настоящий эксперимент. Расчет: 2 — SAHA-N [11]; 3 — *ab initio* расчеты с UPC FPEOS [24]; 4 — UPC SESAME [27]

который в этом случае равен величине, зависящий лишь от степени сжатия плазмы ρ/ρ_0 . В настоящем эксперименте он оказался равен $Gr \approx 0.62$, что близко к идеально-газовому значению $Gr^0 = 2/3 \approx 0.67$ и следует из соотношения на адиабате Гюгоньо

$$E_1 = E_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) (P_1 + P_0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow Gr = V \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_V = \text{const} \approx 0.62. \quad (1)$$

Вопрос о физическом механизме, приводящем к такому значению параметра Грюнайзена в плазме азота при достигнутых параметрах, остается открытым. Именно в связи с этим важным следствием из приведенного на рис. 3 сравнения является тот факт, что ударная адиабата, рассчитанная в рамках подхода *ab initio* (FPEOS [23]), который по своему статусу претендует на роль тоже эксперимента, но «численного», также резко «ломается», но при меньшем давлении $P \approx 0.8 \text{ Мбар}$, и далее также имеет квазиизохорический ход, но уже при плотности $\rho \approx 3 \text{ г/см}^3$, что заметно меньше плотности «свечи» реального эксперимента [10, 11]. Особенно важно, что ударная адиабата, полученная методом *ab initio*, лежит вне экспериментальной ошибки настоящего эксперимента. С учетом быстрого прогресса в возможностях и точности расчетов *ab initio* [23] это расхождение имеет принципиальный характер в соотношении экспериментов реального [10, 11] и численного [23, 24, 42].

Преимуществом техники генерации ударного сжатия азотного флюида в экспериментах настоящей работы является возможность расширить диапазон достигаемых параметров плазмы азота за счет изменения начальной плотности. На рис. 4

приведено такое сравнение для адиабат с начальными плотностями $\rho = 0.51 \text{ г/см}^3$ и $\rho = 0.65 \text{ г/см}^3$. Главным выводом, который позволяет сделать приведенное сравнение с учетом рис. 3, является тот факт, что локация всех пяти новых экспериментальных точек свидетельствует о монотонности зависимости плотности ударно-сжатой плазмы от начальной плотности сжатия. Это свидетельствует об отсутствии самопересечений ударных адиабат, что, в свою очередь, являлось бы признаком попадания экспериментальных точек в область аномальной термодинамики, т.е. в зону отрицательного знака параметра Грюнайзена и большой группы других вторых перекрестных производных термодинамического потенциала [14, 17, 18].

Второй вывод из приведенного на рис. 4 сравнения экспериментальных данных с результатами расчетов по теоретическим моделям состоит в удовлетворительном согласии параметров экспериментальных точек с $\rho = 0.51 \text{ г/см}^3$ и $\rho = 0.65 \text{ г/см}^3$ с расчетами по UPC SAHA-N. В то же время расхождение экспериментальных и расчетных данных, полученных на основе UPC FPEOS [24] и интерполяционного UPC SESAME [27], существенно и выходит за пределы экспериментальной погрешности, декларируемой авторами настоящего эксперимента. Это особенно значимо в отношении расчетов на основании UPC FPEOS ввиду серьезной претензии данных, получаемых по методике FPEOS, на роль тоже эксперимента, но эксперимента «численного».

Наконец, последний важный вывод, следующий из сравнения, приведенного на рис. 4, состоит в том, что, как и в случае сжатия жидкого азота и азотного флюида с $\rho = 0.8 \text{ г/см}^3$, адиабаты на рис. 4, рассчитанные с помощью UPC FPEOS [24], отчетливо

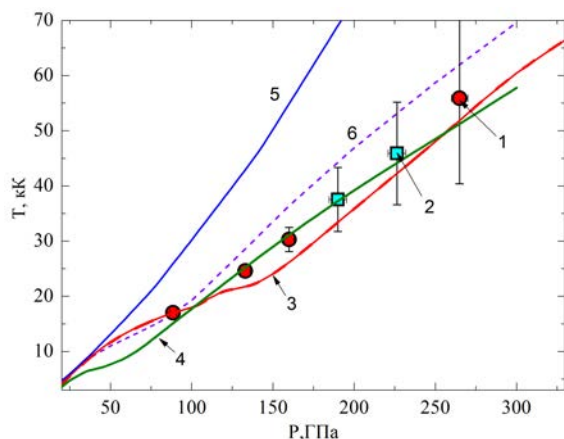


Рис. 5. Зависимости температуры ударно-сжатого азота с начальной плотностью $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.8 \text{ г/см}^3$ от давления. Эксперимент: 1 — сжатие жидкого азота [11]; 2 — сжатие азотного флюида (настоящий эксперимент). Расчет: 3 — SANA-N с учетом молекул N_3 , 4 — расчеты *ab initio* (FPEOS [23]); 5 — URC SESAME [27]; 6 — полуэмпирическая интерполяционная модель сжимаемого коволюма [10, 42]

распадаются на два участка — пологого роста при $P(\rho) \leq P^* \approx 50 \text{ ГПа}$ и крутого квазиизохорического подъема («свечи») при $P(\rho) \geq P^*$ с резким изломом между этими двумя участками.

Таким образом, можно сделать важный вывод, что указанное комбинированное поведение (ход) ударных адиабат в плотной плазме азота воспроизводится как в реальном, так и в «численном» экспериментах, но при несовпадающих параметрах «свечи» с различием, заметно выходящим за рамки точности настоящего эксперимента. Вопрос о физической причине и механизме, ответственных за такое неожиданное поведение ударного сжатия в неидеальной плазме азота, остается открытым.

5. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ УДАРНО-СЖАТОЙ ПЛАЗМЫ АЗОТА

Важным преимуществом экспериментов по ударному сжатию жидкого азота в работе [11] и азотного флюида в настоящих экспериментах является реализация экспериментального измерения температуры сжатой плазмы. Как и ранее, измеренные температуры ударно-сжатого азотного флюида с начальными плотностями $\rho_0(\text{N}_2) = 0.808 \text{ г/см}^3$ и $\rho_0(\text{N}_2) = 0.786 \text{ г/см}^3$ считаются принадлежащими одной и той же ударной адиабате, той же самой, что и адиабата сжатия жидкого азота с начальной плотностью $\rho_0(\text{N}_2) = 0.8 \text{ г/см}^3$ [11]. По этой причине все указанные результаты показаны совместно на рис. 5 в координатах T – P .

На основании этого сравнения можно сделать вывод, что новые экспериментальные данные хорошо согласуются в T – P -координатах с прежними результатами, что подтверждает важный результат экспериментов [11] — линейность в диапазоне давлений $P \approx 1$ – 3.5 Мбар экспериментально измеренной зависимости $T(P)$ на ударной адиабате с начальной плотностью $\rho_0(\text{N}_2) = 0.8 \text{ г/см}^3$.

Вместе с ранее отмеченной изохоричностью этого участка ударной адиабаты указанная линейность зависимости $T(P)$ позволяет сделать несколько очень важных заключений о термодинамических свойствах плазмы азота в этом районе фазовой диаграммы [40].

На участке изохоры неидеальной плазмы азота с плотностью $\rho \approx 3.3 \text{ г/см}^3$ в диапазоне давлений $P \approx 1$ – 3.5 Мбар помимо уже отмеченного ранее постоянства параметра Грюнайзена в совокупности настоящих экспериментов и экспериментов работ [10, 11] зафиксировано примерное постоянство еще трех важнейших термодинамических характеристик, связанных с температурой:

- 1) постоянство величины производной $(\partial P / \partial T)_V$;
- 2) постоянство так называемого фактора сжимаемости плазмы $Z \equiv PV / RT$;
- 3) постоянство изохорной теплоемкости C_V :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \approx \text{const} \approx 4.5 \frac{\text{ГПа}}{\text{К}}, \quad (2)$$

$$Z \equiv PV / RT \approx \text{const} \approx 2.7 \pm 0.2, \quad (3)$$

$$C_V \equiv \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \approx \text{const} \approx 2.0 \frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}. \quad (4)$$

Следует подчеркнуть, что зафиксированное в совокупности настоящих и предыдущих экспериментов ВНИИЭФ [10, 11] высокое значение фактора сжимаемости неидеальной плазмы азота на адиабате $\rho_0 = 0.8 \text{ г/см}^3$, равное $Z \equiv PV / RT \approx 2.7$, достаточно далеко от этой величины как для идеального газа молекул N_2 ($Z = 0.5$), так и для идеального газа атомов N ($Z = 1$) или же для идеальной плазмы $\text{N}^+ + e^-$ ($Z = 2$). Это говорит о том, что даже при наличии идеального газовых черт (2)–(4) плазма азота на изохоре $\rho \approx 3.3 \text{ г/см}^3$ в интервале давлений 1–3 Мбар достаточно далеко от идеальности.

В отличие от результатов эксперимента для адиабаты с $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.8 \text{ г/см}^3$, результаты эксперимента для адиабат с $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.65, 0.51 \text{ г/см}^3$ не столь однозначны. Эти результаты приведены ниже на рис. 6 с теми же обозначениями, что и на рис. 5.

Из приведенного на рис. 6 сравнения следует, что результаты настоящего эксперимента с ударным

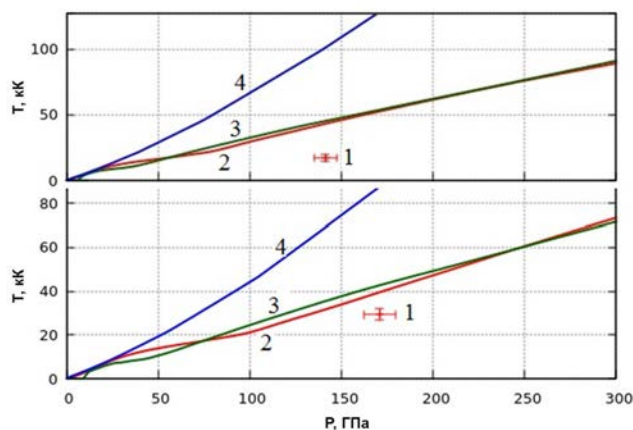


Рис. 6. Зависимости температуры ударно-сжатого азота с начальной плотностью $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.51 \text{ г/см}^3$ (вверху) и $\rho_0(\text{N}_2) \approx 0.65 \text{ г/см}^3$ (внизу) от давления: 1 — настоящий эксперимент (ударное сжатие азотного флюида). Расчет: 2 — UPC SAHA-N [11] с учетом молекул N_3 ; 3 — расчеты *ab initio* (FPEOS [24]); 4 — интерполяционное UPC SESAME [27]

сжатием азотного флюида с пониженной начальной плотностью лучше соответствуют расчетам с UPC SAHA и UPC FPEOS, чем с UPC SESAME, но вместе с тем расхождение теории и эксперимента для ударных адиабат с пониженной начальной плотностью достаточно велико и выходит за рамки экспериментальной погрешности.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены новые эксперименты с интенсивным ударным сжатием предварительно сжатого азотного флюида до состояний мегабарного диапазона давлений. Результаты настоящих экспериментов подтверждают два главных результата экспериментов, выполненных ранее также во ВНИИЭФ, с ударным сжатием жидкого азота: 1) резкий излом хода ударной адиабаты при давлении $P \approx 1$ Мбар и последующая изохоричность участка ударной адиабаты в диапазоне $P \approx 1\text{--}3.5$ Мбар со степенью сжатия ρ/ρ_0 , близкой к идеально-газовой; 2) квазилинейность хода зависимости температуры от давления в этом же интервале давлений. Есть основания предполагать, что такое поведение связано с завершением перехода азота из состояния плотного молекулярного флюида в состояние частично полимеризованной и частично ионизованной плотной неидеальной плазмы азота, сопровождающегося пересечением ATR-зоны.

В рамках расширения экспериментально исследованного диапазона параметров также проведены эксперименты с ударным сжатием азотного флюида с пониженными начальными плотностями. Срав-

нение полученных экспериментальных данных с результатами теоретических расчетов не позволяет в настоящий момент по этим последним экспериментам сделать однозначный вывод, что говорит о целесообразности и желательности дальнейшего продолжения опытов с расширением исследованного диапазона параметров.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения с ОИВТ РАН №075-15-2020-785.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортвов, УФН **179**, 653 (2009).
2. R. J. Barlet, Chemistry & Industry **4**, 140 (2000).
3. И. С. Любути, А. Г. Гаврилюк, Отчет №02.516.11, Институт кристаллографии РАН, Москва (2007).
4. В. Н. Зубарев, Г. С. Телегин, ДАН СССР **142**, 309 (1962).
5. И. М. Воскобойников, М. Ф. Гогоуля, А. Ю. Долгобородов, ДАН СССР **246**, 579 (1979).
6. W. J. Nellis and A. C. Mitchell, J. Chem. Phys. **73**, 6137 (1980).
7. H. B. Radousky, W. J. Nellis, M. Ross et al., Phys. Rev. Lett. **57**, 2419 (1986).
8. H. B. Radousky and M. Ross, High Pres. Res. **1**, 39 (1988).
9. W. J. Nellis, H. B. Radousky, D. C. Hamilton et al., J. Chem. Phys. **94**, 2244 (1991).
10. Р. Ф. Трунин, Г. В. Борисков, А. И. Быков и др., Письма в ЖЭТФ **88**, 220 (2008).
11. М. А. Мочалов, М. В. Жерноклетов, Р. И. Ильяев и др., ЖЭТФ **137**, 77 (2010).
12. M. Ross and F. Rogers, Phys. Rev. B **74**, 024103(2006).
13. Е. С. Якуб, ЖФХ **67**, 305 (1993).
14. А. Б. Медведев, Р. Ф. Трунин, УФН **182**, 829 (2012).
15. В. В. Бражкин, УФН **182**, 847 (2012).
16. А. Б. Медведев, ФГВ №2, 98 (2018).
17. I. L. Iosilevskiy, in *Physics of Extreme States of Matter*, ed. by V. Fortov et al., Chernogolovka: IPCP RAS, Russia (2013), p. 136, arXiv:1403.8053v3.

18. I. L. Iosilevskiy, J. Phys.: Conf. Ser. **653**, 012077 (2015).
19. Е. С. Якуб, ФНТ **20**, 622 (1994).
20. Л. Н. Якуб, ФНТ **19**, 531 (1993).
21. E. S. Yakub and L. N. Yakub, Fluid Phase Equilibria **351**, 43 (2013).
22. E. S. Yakub, J. Low Temp. Phys. **41**, 449 (2015).
23. B. Boates and S. A. Boney, Phys. Rev. Lett. **102**, 015701 (2009).
24. K. P. Driver and B. Militzer, Phys. Rev. B **93**, 064101 (2016).
25. B. Militzer, F. González-Cataldo, Z. Shuai et al., Phys. Rev. E **103**, 013203 (2021).
26. С. К. Гришечкин, С. К. Груздев, В. К. Грязнов и др., Письма ЖЭТФ **80**, 452 (2004).
27. Equation of State for Nitrogen (SESAME Tables).
28. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **159**, 1118 (2021).
29. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **160**, 735 (2021).
30. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, под общей ред. В. Е. Фортова. Том приложений III-1, под ред. А. Н. Старостина, И. Л. Иосилевского, Физматлит, Москва (2004), с. 111.
31. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова, Наука, Москва (2000), с. 299.
32. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 014012 (2015).
33. И. Л. Иосилевский, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, под общей ред. В. Е. Фортова, Том приложений III-1 под ред. А. Н. Старостина, И. Л. Иосилевского, Физматлит, Москва (2004), с. 349.
34. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, Contrib. Plasma Phys. **56**, 352 (2016).
35. D. Young, UCRL-52352, LLNL, Univ. California (1977).
36. Е. С. Якуб, ТВТ **28**, 664 (1990).
37. Е. С. Якуб, ЖФХ **67**, 305 (1993).
38. E. S. Yakub, Physica B **265**, 31 (1999).
39. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ.*, т. 1, под ред. В. П. Глушко и др., Наука, Москва (1978).
40. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, В. Е. Фортов, в *Тезисы докладов Междунар. конф. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны* (XV Харитоновские научные чтения), Саров (2011), с. 99.
41. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, В. Е. Фортов, в *Тезисы докладов Междунар. конф. Экстремальные состояния вещества.* (Забабахинские научные чтения), ВНИИТФ, Снежинск, Россия (2012), с. 120.
42. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, В. Е. Фортов, в *Тезисы докладов Междунар. конф. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны* (XXI Харитоновские тематические научные чтения), Саров (2019), с. 5.

ЭВОЛЮЦИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ КОРОНЫ В РЕЖИМЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ТОКА РАЗРЯДА: ПЕРЕХОД ОТ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОГО РЕЖИМА К СТАЦИОНАРНОМУ ГОРЕНИЮ

А. В. Козырев^{}, А. О. Коковин, В. Ю. Кожевников, В. Ф. Тарасенко, Е. Х. Бакиш,
Н. П. Виноградов*

*Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук
634055, Томск, Россия*

Поступила в редакцию 20 сентября 2022 г.,
после переработки 20 сентября 2022 г.
Принята к публикации 13 октября 2022 г.

Исследована эволюция режимов горения слаботокового коронного разряда в диоде, заполненном атмосферным воздухом, с острым катодом и плоским анодом. Теоретическое описание проведено в рамках осесимметричной многожидкостной модели плазмы, включающей кинетику 9 сортов частиц и 25 плазмохимических реакций. Детально описан разряд в промежутке длиной 10 мм, с радиусом кривизны вершины игольчатого катода 100 мкм, напряжением источника 8 кВ, балластной емкостью 100 пФ и балластным сопротивлением в цепи 1 МОм. Экспериментально и теоретически показано, что в этих условиях разряд за 180 мкс проходит четыре четко различающиеся стадии. Это (1) темная фаза запаздывания пробоя (0–20 мкс); (2) фаза частотно-импульсного режима Тричела с переменной скважностью и квазистационарной составляющей тока короны (20–80 мкс); (3) промежуточная фаза монотонно возрастающего слабого тока (80–130 мкс), завершающаяся колебательным переходом к (4) стационарной фазе (130–180 мкс), имеющей типичную структуру тлеющего разряда. Проанализированы тенденции изменения параметров коронного разряда при вариации питающего напряжения. Теоретические расчеты хорошо соответствуют экспериментальным данным.

DOI: 10.31857/S004445102302013X
EDN: OQZQYI

1. ВВЕДЕНИЕ

Самостоятельный коронный разряд в воздухе является одним из самых распространенных видов электрического разряда в технике [1–4]. Это обусловлено, в первую очередь, простотой его технической реализации и широким спектром возможного применения в качестве источника атмосферных ионов (люстра Чижевского), источника химически активных радикалов и возбужденных молекул, источника ионизирующего ультрафиолетового излучения, электрофильтров для очистки воздуха от вредных примесей и т.п. Несмотря на довольно длительную историю изучения коронного раз-

ряда [1, 3–5] и большое количество новых публикаций [6–13], остается еще много особенностей, которые нуждаются в дополнительном исследовании. Наибольшими перспективами в технических приложениях обладает коронный разряд в атмосферном воздухе (озонаторы помещений, обработка биологических объектов, стерилизация поверхностей и инструмента), поэтому именно короне в воздухе уделяется повышенное внимание исследователей [6–16].

Одной из особенностей коронного разряда в воздухе является импульсный режим функционирования, который впервые наблюдался Тричелом в лаборатории Лёба [5]. Этот режим горения короны, характеризующийся довольно регулярной последовательностью импульсов, наблюдается в воздухе, как правило, в ограниченном диапазоне напряжений на диоде. В некоторых технических приложениях управляемость параметрами режимов горения разряда может дать определенное преимущество пе-

^{*} E-mail: kozyrev@to.hcei.tsc.ru

ред неуправляемыми режимами. Поэтому выяснение условий функционирования импульсного режима и причины его перехода в другую форму представляют большой интерес как с научной, так и технической стороны.

В данной работе авторы сосредоточились на исследовании последовательной эволюции всех форм горения короны с отрицательно заряженного острия при подаче на разрядный промежуток монотонно возрастающего напряжения, которое естественным образом формировалось в электрической цепи за счет большого балластного сопротивления и емкости диода. Такие режимы поддержания коронного разряда часто используются в технических устройствах. Экспериментальные измерения разрядного тока и напряжения на острие сопровождались теоретическим моделированием разряда в рамках многожидкостной нестационарной модели атмосферной плазмы [14].

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОЗДУШНОЙ ПЛАЗМЫ

На рис. 1 схематически показана осесимметричная геометрия задачи и конфигурация вычислительного домена.

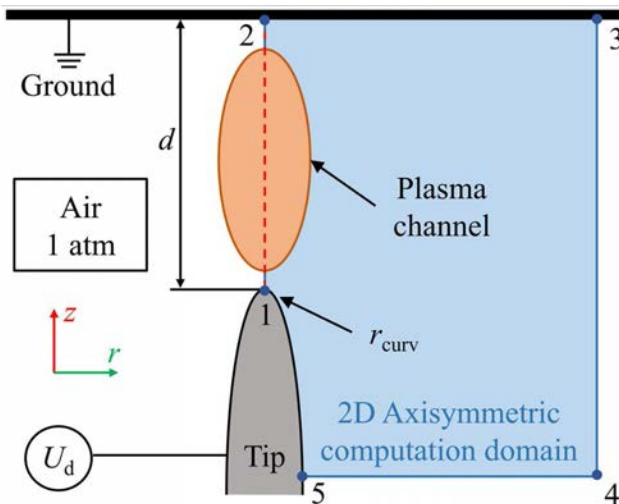


Рис. 1. Схема разрядной геометрии и вычислительного домена 1–2–3–4–5

Плазма описывалась в рамках диффузионно-дрейфового движения электронов и ионов в самосогласованном электрическом поле. Пространственно-временная эволюция плазмы описывалась системой

уравнений непрерывности в частных производных для плазменных компонент:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_e = R_e, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_\varepsilon + \mathbf{j}_\varepsilon \cdot (-e\mathbf{E}) = R_\varepsilon, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_k = R_k, k = 1, \dots, N, \quad (3)$$

где e — элементарный заряд, n_e и n_ε — концентрация электронов и плотность их внутренней энергии, $\mathbf{j}_e$ и $\mathbf{j}_\varepsilon$ — поток электронов и поток их внутренней энергии, R_e и R_ε — скорости рождения — гибели электронов и роста — потери их энергии в неупругих столкновениях соответственно, R_k — скорость рождения — гибели k -го сорта ионов, N — общее количество сортов ионов, $\mathbf{E}$ — напряженность поля.

Уравнения для частиц были связаны с уравнением Пуассона для вычисления самосогласованной напряженности поля:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left(\sum_{k=1}^M z_k n_k - n_e \right), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (4)$$

где ε_0 — электрическая постоянная, z_k — зарядность k -го сорта ионов с учетом его знака, φ — электрический потенциал.

Напряжение на диоде U_d и ток через промежуток I вычислялись из уравнения Кирхгофа для электрической цепи и с помощью интеграла по поверхности катода или анода:

$$U_d = U_0 - \left(I + C_b \frac{dU_d}{dt} \right) R_b, \quad (5)$$

$$I = \int_S \left[e \left(\sum_{k=1}^N z_k \mathbf{j}_k - \mathbf{j}_e \right) + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right] dS, \quad (6)$$

где U_0 — напряжение на внешнем источнике (в этих расчетах полагалось постоянным), R_b — большое балластное сопротивление, включенное в последовательную цепь с источником и диодом, C_b — балластная емкость, включенная в цепь параллельно диоду (учитывает также межэлектродную емкость диода).

Кинетическая схема для искусственного воздуха ($N_2 : O_2 = 4 : 1$) была сделана максимально упрощенной, поэтому она включает в себя лишь 9 сортов частиц (свободные электроны e и 8 видов тяжелых частиц N , N_2 , N_2^+ , O , O_2 , O_2^+ , O_4^+ , O_2^-) и 10 типов химических реакций, которые сведены в таблицу. В

Таблица 1. Упрощенная кинетическая схема искусственного воздуха

№	Реакция
1 (2+2)	$e + M_2 \leftrightarrow e + M_2^+ + e$
2 (2+2)	$e + O_2 + M_2 \leftrightarrow O_2^- + M_2$
3	$O_2 + N_2^+ \rightarrow N_2 + O_2^+$
4 (2+2)	$O_2 + O_2^+ + M_2 \leftrightarrow O_4^+ + M_2$
5 (2)	$e + M_2^+ \rightarrow M + M$
6	$e + O_4^+ \rightarrow O_2 + O_2$
7 (4)	$e + M_2^+ + M_2 \rightarrow M_2 + M_2$
8	$O_2^- + O_4^+ \rightarrow O_2 + O_2 + O_2$
9 (2)	$O_2^- + M_2^+ \rightarrow O_2 + M_2$
10 (2)	$e + M_2 \rightarrow e + M + M$

Примечание: символ М обозначает N и/или O.

некоторых строках таблицы, где есть символ М, объединены несколько прямых и обратных реакций с близкими скоростями (в скобках рядом с номером показано количество объединенных в строке реакций), поэтому наша расчетная схема в реальности учитывает 25 реакций.

Основным каналом размножения заряженных частиц были реакции ударной ионизации молекул исходного газа электронами (реакции 1 в таблице). Скорость этих реакций, имеющих высокую пороговую энергию электронов, очень чувствительна к виду энергетического спектра электронов, и поэтому она вычислялась с помощью специальной процедуры BOLSIG+ [15], использующей известные данные о сечениях ионизации. Иные каналы ионизации (ступенчатая, диссоциативная и т.п.) в нашей модели не учитывались. В модель включено прилипание свободных электронов к кислороду с образованием молекулярного отрицательного иона и обратная реакция теплового отлипания (реакции 2). В схему включены реакции ионной конверсии (реакции 3, 4), имеющие большие сечения и определяющие ионный состав плазмы. В схеме учитывались четыре вида электрон-ионной рекомбинации (обратные реакции 1 и реакции 5–7) и три реакции ион-ионной рекомбинации (реакции 8, 9) с известными скоростями [16].

Апробация плазмохимической модели показала, что в нее необходимо добавить две реакции ударной диссоциации молекул (реакции 10 в таблице), так как они играют исключительно важную роль в формировании хвоста энергетического спектра свободных электронов, определяющего скорости всех неупругих процессов с участием электронов. Эти

реакции имеют сильно различающиеся пороговые энергии разрыва связи (9.7 эВ для N_2 и 5.12 эВ для O_2), и эта разница была учтена в расчетах скоростей реакций. Так, без учета реакций 10 рассчитанный коэффициент ионизации Таунсенда α для воздуха получался сильно завышенным по сравнению с известными данными, а учет диссоциации обеспечивает реальную величину коэффициента α .

Поскольку нашей целью является описание электродинамических параметров разряда, а не его подробной плазмохимии, мы не стали усложнять модель введением возбужденных атомов и молекул и композитных молекул (типа N_xO_y). Представленная в таблице схема реакций обладает свойством «минимальной полноты». Это означает, что добавление любой дополнительной реакции лишь незначительно меняет результаты вычислений, а исключение из схемы любой из указанных выше реакций, наоборот, существенно влияет на результат.

Система уравнений (1)–(6) решалась с граничными условиями на металлических электродах и открытых границах (граница 3–4–5 на рис. 1). На электродах (границы вычислительного домена на катоде 5–1 и на аноде 2–3 на рис. 1) коэффициент вторичной ион-электронной эмиссии был принят $\gamma = 0.01$ для всех видов ионов, а электроны полностью поглощались на аноде. На катоде также учитывалась полевая эмиссия на шероховатой поверхности, как это описано в работе [17], а все эмитированные электроны имели начальную кинетическую энергию 0.026 эВ (комнатная температура). На открытых границах домена (границы 3–4–5 на рис. 1) нормальные компоненты напряженности поля и всех потоков заряженных частиц полагались равными нулю. Для инициирования счета во всем пространстве задавалось однородное распределение начальных электронов комнатной температуры с концентрацией 1 см^{-3} .

Особенности вычислительного метода. Численное решение системы уравнений в частных производных проведено методом конечных элементов в среде COMSOL [18] с дополнительными мерами стабилизации процесса сходимости расчета. Для двумерной геометрии (в пределах домена 1–2–3–4–5–1 на рис. 1) была точно настроена расчетная сетка переменной густоты (среднее число элементов сетки в домене 10^5), причем минимальный размер элемента сетки (на вершине иглы) был $\sim 1 \text{ мкм}$, а максимальный (вдали от электродов) — 0.2 мм . Для корректного разрешения приграничных эффектов счета были использованы пограничные слои.

3. ОБЩАЯ ДИНАМИКА КОРОННОГО РАЗРЯДА С СИЛЬНЫМ ОГРАНИЧЕНИЕМ ТОКА

Рассмотрим основные закономерности эволюции коронного разряда, хотя и на частном примере, он демонстрирует весьма общие свойства короны. Параметры разрядной цепи и геометрические характеристики диода являются типичными для технических приложений короны. Радиус кривизны вершины игольчатого катода принят равным 100 мкм (это типичное значение для технических систем, так как более острые вершины быстро сглаживаются в процессе горения разряда за счет эрозии электрода, а менее острые требуют повышенных напряжений для инициирования короны). Длина промежутка от вершины острия до плоского анода равна $d = 10$ мм. Поскольку типичные напряжения в коронно-разрядных системах для таких зазоров лежат в диапазоне 5–30 кВ (в зависимости от назначения разряда), напряжение источника питания в расчетах также варьировалось. Параллельно диоду включена балластная емкость $C_b = 100$ пФ (такая емкость в реальных схемах принципиально неизбежна как межэлектродная емкость диода, но в технических устройствах может быть реализована в виде отдельного конденсатора). Балластное сопротивление, ограничивающее ток в цепи, в этом примере принято равным $R_b = 1.0$ МОм, что ограничивает стационарный ток в цепи разряда на миллиамперном уровне (это типично для техники коронного разряда в целях предотвращения короткого замыкания цепи и необратимого разрушения устройства).

На рис. 2 показаны полученные в расчете временные профили тока разряда и напряжения на промежутке для двух разных напряжений источника U_0 . Благодаря большой балластной емкости и сопротивлению, напряжение на диоде медленно увеличивается (время $R_b C_b = 100$ мкс), и коронный разряд последовательно проходит четыре ярко выраженные стадии.

Первая стадия, которую можно назвать предпробойной, характеризуется ростом напряжения на диоде от нуля до примерно $U_1 = 1500$ В. На этой стадии диод остается «холодным», размножение иницирующих и эмитированных электронов еще не значительно. Длительность этой стадии τ_1 , которую легко оценить из выражения $U_1 = U_0(\tau_1 / R_b C_b)$, можно назвать временем запаздывания пробоя.

Вторая стадия начинается быстрым ростом плотности плазмы у вершины острейшего электрода и формированием первого импульса тока, за

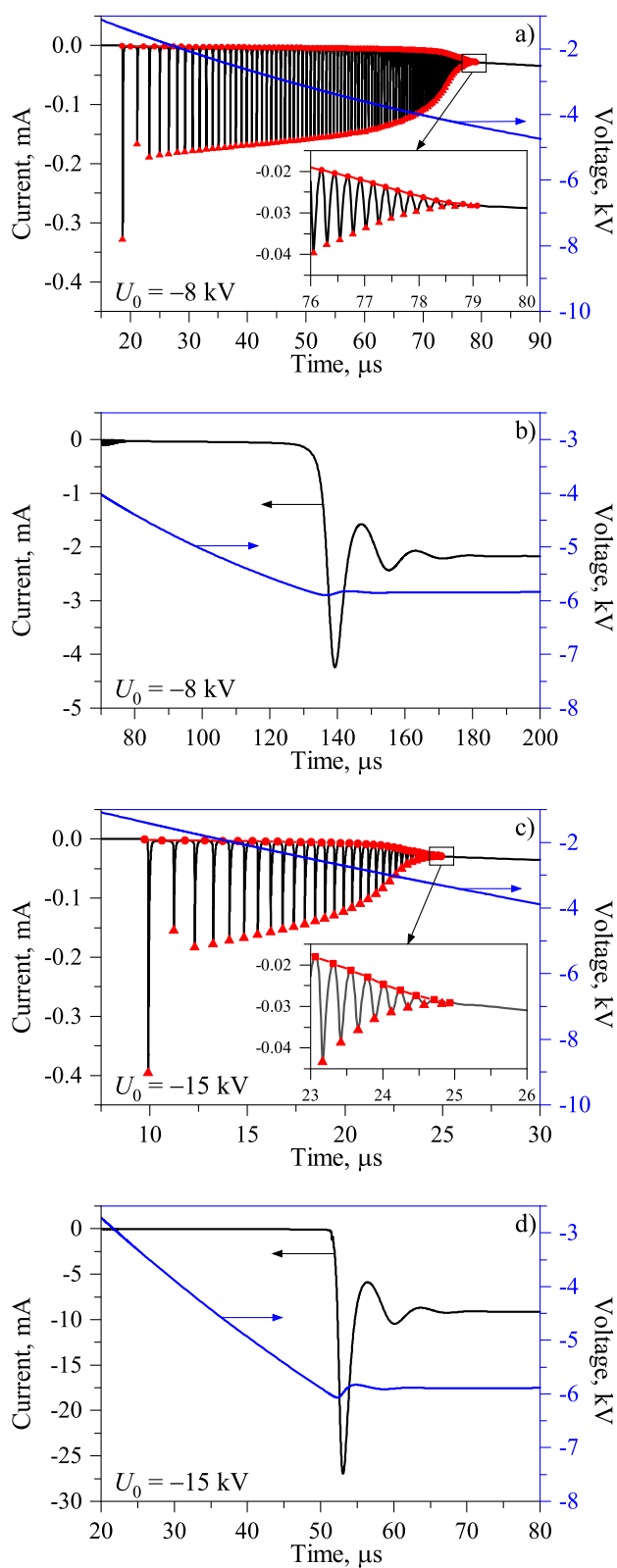


Рис. 2. Временные профили тока коронного разряда (черные линии) и напряжения на диоде (синие линии, правая ось ординат)

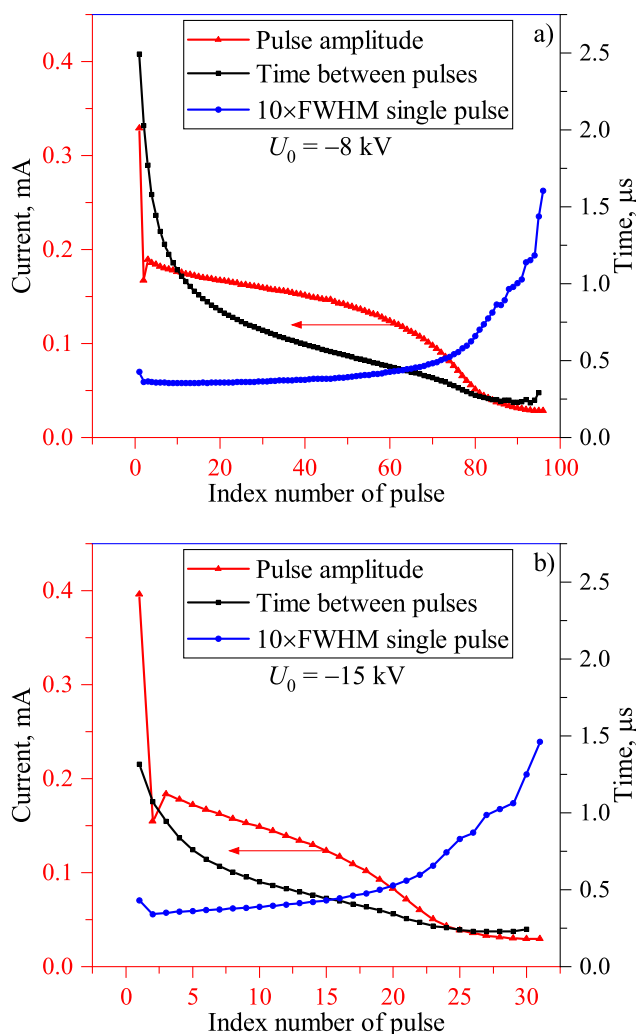


Рис. 3. Дрейф амплитуд, длительностей на полувысоте и межимпульсных интервалов в режиме импульсов Тричела в зависимости от номера импульса в последовательности

которым следует частотно-импульсная последовательность импульсов Тричела [5–16]. Кроме того, в паузах между импульсами протекает квазистационарный ток, амплитуда которого увеличивается с ростом напряжения. Физические процессы, ответственные за формирование первого импульса тока, детально исследованы в работе авторов [19], и здесь мы не будем останавливаться на этих подробностях. В ситуации сильного ограничения тока разряда балластом напряжение на промежутке постепенно растет и, как следствие, параметры режима импульсов Тричела также дрейфуют (рис. 3).

Из сравнения расчетов для двух напряжений источника, показанных на рис. 2 и 3, можно сделать очень важные выводы о внутренних характеристиках режима Тричела. Так, амплитуды и длительности

импульсов тока практически не зависят от напряжения источника, плавно изменяясь с ростом напряжения на диоде. Амплитуды снижаются (а длительности импульсов растут) при увеличении приложенного напряжения и плавно стремятся к нулю. Частота следования импульсов Тричела дрейфует от 0.7–1.0 МГц в начале до 4.0 МГц к концу второй стадии. Примечательно, что ток разряда в конце режима Тричела, т.е. к моменту перехода в третью стадию, не зависит от напряжения источника и составляет 27–29 мкА (это хорошо видно на вставках рис. 2а,с). Отсюда можно сделать осторожный вывод о том, что прекращение импульсного режима коронного разряда обусловлено не столько приложенным напряжением (оно как раз заметно различается: 4.3 кВ и 3.3 кВ при $U_0 = 8$ и 15 кВ соответственно), сколько плотностью нарабатанной плазмы перед вершиной острейшего катода.

Третья стадия, начинающаяся после затухания импульсного режима, характеризуется монотонным ростом тока разряда и завершается резким переходом к сильноточному режиму, как видно на рис. 2б,д. Этой стадии коронного разряда уделяется очень мало внимания в научных публикациях, если ее вообще упоминают. Хотя именно она ответственна за постепенное формирование классической структуры тлеющего разряда вдоль оси диода.

Переход от третьей стадии к четвертой очень похож на таунсендовский пробой газоразрядного промежутка после превышения напряжением порогового значения (в нашем случае это пороговое напряжение примерно 6.0 кВ). А именно, медленный рост тока с микроамперного уровня внезапно сменяется крутым ростом на несколько порядков величины, причем переход носит характер релаксационных затухающих колебаний (см. рис. 2б,д). Эта аналогия полностью подтверждается расчетами кинетики заряженных частиц и электрического поля: при приближении напряженности поля к пороговому значению происходит лавинообразный рост концентрации свободных электронов, заряд которых быстро перераспределяет электрическое поле от примерно равномерного по длине промежутка к его компрессии вблизи катода, характерной для тлеющего разряда. Поэтому переход от третьей стадии короны к четвертой можно назвать «повторным пробоем» газонаполненного диода.

На четвертой стадии реализуется стационарная структура классического тлеющего разряда, хотя геометрия промежутка теперь сильно отличается от плоской. Распределение концентрации плазмы остается сильно неоднородным, что характерно для

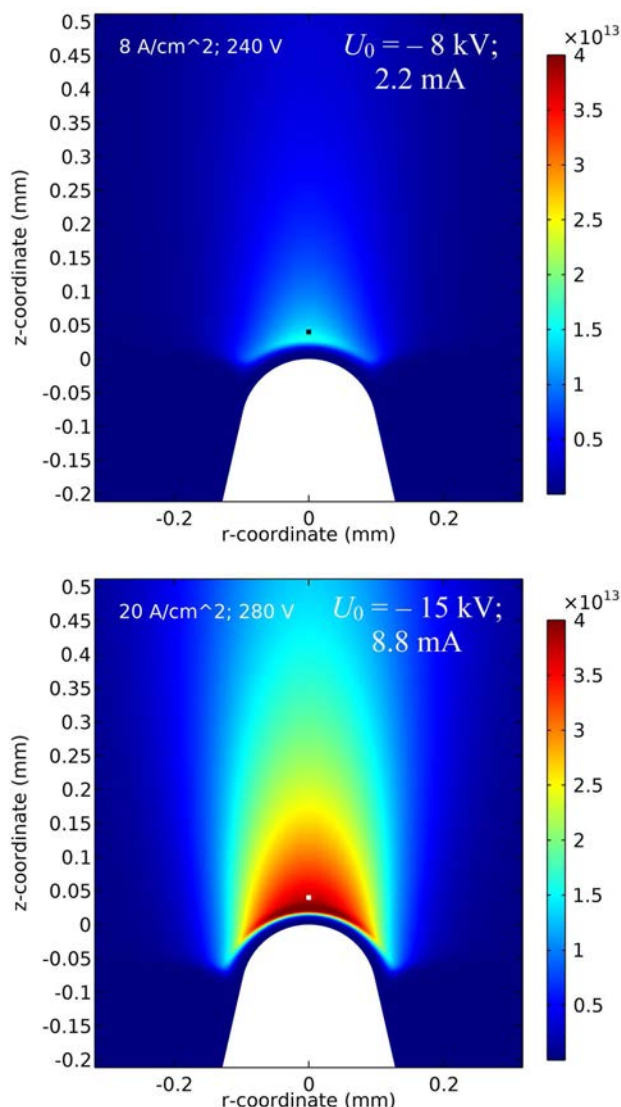


Рис. 4. Пространственное распределение концентрации свободных электронов в стационарном разряде (справа показана общая шкала плотности в см^{-3}). Вверху слева указаны локальная плотность тока и электрический потенциал (относительно катода) в отмеченной точке ($z = 50 \text{ мкм}$)

короны, как показано на рис. 4.

Отметим, что увеличение напряжения источника U_0 сказывается только на токе разряда и никак не отражается на напряжении горения разряда, поддерживающегося на уровне 5.9 кВ. Напряженность электрического поля практически однородна вдоль оси разряда и также одинакова ($\approx 5.6 \text{ кВ/см}$), хотя плотность тока сильно уменьшается из-за уменьшения плотности плазмы при удалении от острия. Этот неочевидный факт (постоянства напряжения горения при большой вариации тока разряда) обусловлен тем, что плотность тока в этой стадии разряда

определяется процессами в прикатодной области, а остальной столб (в тлеющем разряде он называется положительным) играет пассивную роль проводника, на поддержание проводимости которого достаточно одного и того же напряжения.

Интересно поэтому сравнить параметры прикатодного слоя объемного заряда в нашем коронном разряде с известными параметрами нормального тлеющего разряда в воздухе в пересчете к атмосферному давлению [2]: падение напряжения в среднем 270 В (зависит от материала катода), толщина слоя около 6 мкм, плотность тока порядка 200 А/см^2 . Как видно на рис. 4, плотность тока на оси вблизи вершины ($8\text{--}20 \text{ А/см}^2$) в десятки раз ниже «нормальной», толщина прикатодного слоя ($20\text{--}15 \text{ мкм}$) в разы больше «нормальной», а прикатодное падение напряжения ($240\text{--}280 \text{ В}$) практически равно «нормальному». При этом напряжение на слое растет, а толщина слоя уменьшается с ростом плотности тока, что обычно свойственно аномальному тлеющему разряду, хотя плотность тока на порядок ниже «нормальной». Эти отклонения от «нормальных» параметров показывают особый (нестандартный) режим функционирования прикатодного слоя в стационарном коронном разряде, явно обусловленном его сильно неоднородной геометрией.

4. СРАВНЕНИЕ РАСЧЕТА С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

В специальных экспериментах, реализующих режим ограничения тока коронного разряда, имеют место неизбежные в сравнении с расчетным вариантом усложнения электрической цепи. Хотя это и приводит к количественным вариациям осциллограмм разрядного тока и напряжения, но на качественном уровне они хорошо воспроизводятся. К сожалению, из-за большой разницы в уровне токов на разных стадиях развития коронного разряда в эксперименте не удастся одновременно зафиксировать все четыре стадии, как это было представлено в расчетах на рис. 2. Например, при регистрации малых амплитуд тока на стадии импульсов Тричела рискованно допускать в цепи большой ток стационарного разряда. Поэтому на рис. 5 показан «компромиссный» пример экспериментальных временных профилей тока и напряжения в диоде с острийным катодом, параметры которого были следующими: радиус кривизны вершины 100 мкм (как в расчете), длина зазора 3 мм, напряжение источника 5.3 кВ, балластный резистор 1 МОм (как в расчете), балласт-

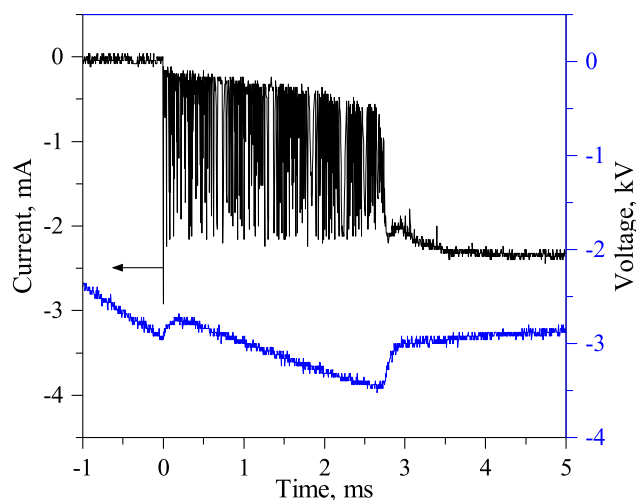


Рис. 5. Экспериментальные профили тока коронного разряда и напряжения на промежутке с параметрами, близкими к параметрам расчетной модели. Полоса пропускания осциллографа 1 ГГц

ная емкость 4.7 нФ. Такие параметры обеспечивали соизмеримый уровень тока разряда на всех стадиях.

В целом этот эксперимент дает ту же общую картину эволюции коронного разряда, что была получена при моделировании: четко видны первые две и четвертая стационарные стадии разряда, а третья (слаботочная переходная стадия) не реализуется, так как средний уровень тока к концу режима Тричела (1.4 мА) оказался близким к стационарному току (2.4 мА). Естественно, что повышенный уровень меняющегося тока разряда в эксперименте заметно сказывался на диодном напряжении, чего не было в расчете. Большой средний ток разряда в этом эксперименте был обусловлен высокой средней напряженностью поля (на уровне 10 кВ/см в эксперименте против 4.2 кВ/см в расчете). Этот же фактор сильного поля обеспечивает достаточные условия для формирования стационарной структуры тлеющего разряда без длительной переходной (третьей) стадии, как это было в расчете. В иных экспериментальных условиях, когда ток импульсной короны был на порядки меньше стационарного тока последней стадии, длительная слаботочная (третья) стадия четко фиксировалась в эксперименте.

Можно упомянуть и другие отличия экспериментальных зависимостей (рис. 5) от расчетных (рис. 2). В эксперименте наблюдается стохастический характер амплитуд в последовательности импульсов Тричела, что и следовало ожидать, так как здесь не было симметрии в процессах генерации разрядной плазмы. Кроме того, в нашей теоретической моде-

ли нагрев газа в разрядной области не учитывался, а в эксперименте этот эффект неизбежно должен сказываться на вариативности условий разряда от импульса к импульсу.

5. ИОННЫЙ СОСТАВ И МЕХАНИЗМ ТОКОПЕРЕНОСА В ПЛАЗМЕ

Можно констатировать, что сформулированная нами теоретическая модель коронного разряда позволяет в целом правильно описывать динамику развития ионизационных процессов и получать верную оценку наблюдаемых параметров разряда на всех стадиях его горения. Так, расчетная модель соответствует эксперименту в том, что в обоих случаях первый импульс Тричела имеет максимальную амплитуду тока, а второй в несколько раз ниже первого.

На базе плазмохимической схемы (см. таблицу) можно сделать детальный расчет «парциального состава тока разряда», пример которого показан на рис. 6. В этом расчете параметры разряда были следующими: напряжение источника 8 кВ, длина промежутка 10 мм, радиус кривизны острия 20 мкм, балластное сопротивление 18 МОм.

Рисунок 6, где показана локальная динамика токов в плазме вблизи острейного катода (на расстоянии 100 мкм от вершины острия), позволяет выяснить дополнительные детали развития разряда,

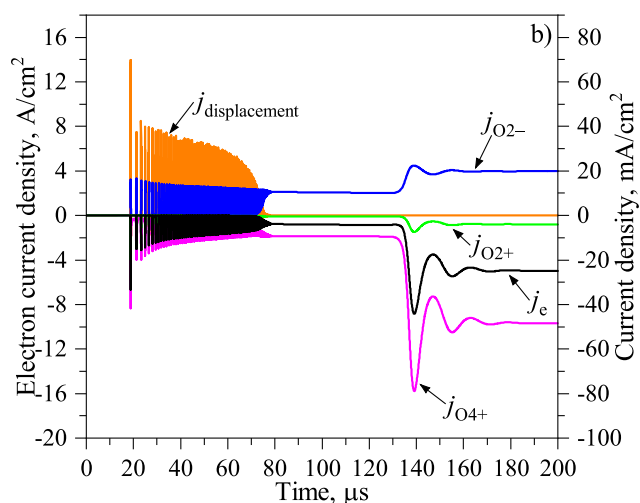


Рис. 6. Временная развертка парциальных плотностей токов на оси системы в точке, удаленной на 100 мкм от вершины острия. Ток электронов отображается на левой оси ординат, а остальные токи — на правой. Ток отрицательных ионов O_2^- показан как положительный для удобства анализа результатов расчета

в частности, изменения в ионном составе плазмы и механизме переноса заряда на разных стадиях разряда.

Так, в частотно-импульсной стадии разряда амплитуда тока смещения Максвелла в несколько раз превышает амплитуды тока ионов, а последние примерно в 200 раз меньше амплитуды тока свободных электронов. С учетом соотношения масс ($\sqrt{M_i/m_e} \simeq 240$) это означает, что концентрации электронов и ионов в плазме на этой стадии соизмеримы, и плазму можно назвать электрон-ионной. Это соотношение концентраций электронов и ионов примерно в два раза снижается в третьей (квазистационарной) стадии переноса тока, и здесь, естественно, ток смещения Максвелла равен нулю.

Соотношения токов и концентраций еще заметней меняется на стационарной (четвертой) стадии разряда. Суммарная плотность тока ионов в этой стадии равна примерно 90 мА/см^2 , а плотность тока свободных электронов — примерно 5 А/см^2 , что всего приблизительно в 50 раз выше. Это означает, что в плазме концентрация свободных электронов в несколько раз ниже концентрации ионов, но проводимость плазмы по-прежнему является электрон-ионной. Такая ситуация типична для воздушной плазмы [20–22], когда ее квазинейтральность поддерживается балансом положительных и отрицательных ионов, а перенос тока обеспечивается электронами, что рис. 6 также хорошо демонстрирует.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Анализ результатов теоретического моделирования и сравнение с данными экспериментов позволяет сделать ряд обобщающих выводов о режиме сильного ограничения тока коронного разряда в воздухе атмосферного давления, когда ток с единичного острия не превышает нескольких миллиампер.

Процесс формирования коронного разряда по мере роста напряжения на диоде может проходить четыре разные стадии: стадия запаздывания пробоя, стадия импульсов Тричела, стадия монотонного роста тока, завершающаяся «вторым пробоем» и переходящая в стадию стационарного тлеющего разряда.

Режим импульсов Тричела реализуется в ограниченном диапазоне напряжений (на рис. 2 это широкий диапазон 1.4–3.9 кВ, на рис. 5 диапазон более узкий 3.0–3.4 кВ). Если по условиям опыта (расчетного или экспериментального) напряжение не поднимается выше верхнего предела этого диапазона,

то импульсно-периодический режим Тричела может иметь неопределенно большую длительность. Если напряжение будет чуть выше нижнего предела, то импульсный режим может иметь очень низкую частоту повторения, вплоть до единиц Гц. Амплитуда импульсов Тричела при этом существенно не меняется [19].

Как показало детальное моделирование генерации самого первого импульса Тричела [19], нижний предел напряжения U_1 для запуска импульсного режима отвечает локальной напряженности поля в окрестности вершины острия на уровне двукратной статической пробивной напряженности плоского промежутка. Для воздуха последняя равна $\sim 30 \text{ кВ/(см} \cdot \text{атм)}$. Такой уровень локального поля как раз обеспечивает формирование структуры и поддержание самостоятельного заряда. Для оценки напряженности поля у вершины острия можно воспользоваться известной формулой $E_{max} = (U_1/r_{curv})/\ln(2\sqrt{d/r_{curv}})$, которая является точной для геометрии «гиперboloид вращения–плоскость». Для условий рис. 2 ($U_1 = 1500 \text{ В}$, $d = 1 \text{ см}$, $r_{curv} = 0.01 \text{ см}$) эта формула дает оценку $E_{max} = 50 \text{ кВ/см}$, что примерно в 2 раза превышает статический порог пробоя.

Верхнему пределу напряжения $U_2 = 5.9 \text{ кВ}$ отвечает ситуация, когда стационарная плазма может поддерживаться по всей длине промежутка, что возможно при средней напряженности поля на уровне $E_{aver} = U_2/d \approx 6 \text{ кВ/см}$. Именно такой уровень напряженности поля ($\sim 5 \text{ кВ/см} \cdot \text{атм}$) имеет место в положительном столбе тлеющего разряда в воздухе [2].

Если напряжение на диоде создает среднее поле существенно выше этого уровня, то промежуточная стадия перехода от импульсного режима к стационарному разряду может быть короткой или вообще отсутствовать. Эта ситуация имеет место на рис. 5, когда средняя напряженность к концу второй стадии уже равна 11 кВ/см .

Изменяя величину балластного сопротивления R_b , можно менять ток разряда и его мощность. Тот факт, что напряжение горения стационарного разряда при изменении тока остается почти неизменным, позволяет рассчитать КПД коронного разряда η как отношение энергии, выделяемой в разряде, к энергии, потребляемой от источника питания: $\eta = IU_2/IU_0 = E_{aver}d/U_0$. Таким образом, при заданном давлении, сорте газа и конструкции диода (т.е. заданном напряжении $U_2 = E_{aver}d$) КПД системы полностью определя-

ется уровнем напряжения источника питания U_0 . А абсолютная мощность W , выделяемая в разряде, зависит еще и от балластного сопротивления: $W = U_2(U_0 - U_2)/R_b = (U_0^2/R_b)\eta(1 - \eta)$. Пока выделяемая мощность невелика, чтобы повлиять на плотность газа внутри плазменного канала, величину $U_2 = E_{aver}d$ можно считать примерно постоянной и известной, но с ростом мощности (при снижении, например, балласта R_b) газ в канале будет заметно «прореживаться» [2], и кинетика плазмы может существенно измениться по сравнению с рассмотренной здесь моделью. Поэтому изложенные выше результаты и выводы справедливы, пока ток «короткого замыкания» $I_{sc} = U_0/R_b$ не превышает десятка миллиампер.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22–29–00137).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. P. Loeb, *Electrical Coronas*, University of California, Berkeley CA (1965).
2. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Издательство «Интеллект», Долгопрудный (2009).
3. В. Н. Ужов, *Очистка промышленных газов электрофильтрами*, Издательство «Химия», Москва (1967).
4. В. В. Базуткин, В. П. Ларионов, Ю. С. Пинталь, *Техника высоких напряжений. Изоляция и перенапряжения в электрических системах*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
5. G. W. Trichel, *Phys. Rev.* **54**, 1078 (1938).
6. M. Černák, T. Hoder, and Z. Bonaventura, *Plasma Sour. Sci. Technol.* **29**, 013001 (2020).
7. V. Tarasenko, E. Baksht, V. Kuznetsov, V. Panarin, V. Skakun, E. Sosnin, and D. Beloplotov, *J. Atmosph. Sci. Research* **3**(4), 28 (2020).
8. N. G. C. Ferreira, D. F. N. Santos, P. G. C. Almeida, G. V. Naidis, and M. S. Benilov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 355206 (2019).
9. P. Sattari, C. F. Gallo, G. S. P. Castle, and K. Adamiak, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44**, 155502 (2011).
10. S. Chen, K. Li, and S. Nijdam, *Plasma Sour. Sci. Technol.* **28**, 055017 (2019).
11. Y. Zheng, L. Wang, D. Wang, and S. Jia, *Phys. Plasmas* **24**, 063515 (2017).
12. J. Mizeraczyk, A. Berendt, and Y. Akishev, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 155204 (2018).
13. A. Sun, X. Zhang, Y. Guo, Y. He, and G. Zhang, *Chinese Phys. B* **30**, 055207 (2021).
14. A. O. Kokovin, A. V. Kozыrev, and V. Yu. Kozhevnikov, *J. Phys.: Conf. Series* **2064**, 012024 (2021).
15. G. J. M. Hagelaar and L. C. Pitchford, *Plasma Sour. Sci. Technol.* **14**, 722 (2005).
16. I. A. Kossyi, A. Y. Kostinsky, A. A. Matveev, and V. P. Silakov, *Plasma Sour. Sci. Technol.* **1**, 207 (1992).
17. N. M. Zubarev, V. Y. Kozhevnikov, A. V. Kozыrev et al., *Plasma Sour. Sci. Technol.* **29**, 125008 (2020).
18. COMSOL Multiphysics® v. 6.0. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
19. V. F. Tarasenko, E. Kh. Baksht, N. P. Vinogradov, A. V. Kozыrev, A. O. Kokovin, and V. Yu. Kozhevnikov, *JETP Lett.* **115**, 667 (2022).
20. Ю. С. Акишев, И. В. Кочетов, А. И. Лобойко, А. П. Напартович, *Физика плазмы* **28**, 1136 (2002).
21. Yu. S. Akishev, M. E. Grushin, V. B. Karal'nik, and N. I. Trushkin, *Plasma Phys. Rep.* **27**, 520 (2001).
22. Yu. Akishev, M. Grushin, I. Kochetov, V. Karal'nik, A. Napartovich, and N. Trushkin, *Plasma Sour. Sci. Technol.* **14**, S18 (2005).

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 Телефон: +7 (499) 137 56 22

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ акад. М. В. САДОВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
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