

ISSN 0044-4510

Том 163, Выпуск 5

Май 2023



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 5

МАЙ 2023

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Нелинейное поглощение и фотолюминесценция нанотетраподов CdTe с наконечниками CdSe при нерезонансном возбуждении экситонов Гаврилов С. Ю., Смирнов А. М., Козлова М. В., Васильев Р. Б., Днепровский В. С. 621

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Распад скалярона в пертурбативной квантовой гравитации Латош Б. Н. 628
- Калибровка считывающей электроники детектора "Троицк ню-масс" с использованием цифровых фильтров сигналов Абдиганиева С. Б., Берлев А. И., Бочков М. А., Лиховид Н. А., Пантуев В. С., Задорожный С. В. 641
- Охлаждение струй для тяжелых флейворов в AA - и pp -столкновениях Захаров Б. Г. 646
- Черная дыра и темная материя в синхронной системе координат Мейерович Б. Э. 660

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Терагерцевая спектроскопия с временным разрешением (THz-TDS) светодиодных гетероструктур с тремя и пятью квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. . Бурмистров Е. Р., Авакянц Л. П. 669

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

- Зависимость диэлектрической проницаемости и электрокалорического эффекта от размера гранулы сегнетоэлектрической керамики Старков А. С., Старков И. А. 682

Электрическая поляризация в двойном манганите $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$: мессбауэровское исследование на зон- довых ядрах ^{57}Fe	698
..... Ниценко В. И., Соболев А. В., Белик А. А., Глазкова Я. С., Пресняков И. А.	

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Влияние структурных параметров на особенности электронной структуры топологических поверх- ностных состояний MnBi_2Te_4	708
..... Макарова Т. П., Шикин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В.	

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Исследование влияния скорости набегающего потока на течение, индуцируемое диэлектрическим барьерным разрядом	717
..... Поливанов П. А., Вишняков О. И., Кисловский В. А., Сидоренко А. А.	
Статистика пассивного скаляра в двумерном сдвиговом течении с флуктуациями	724
..... Ивченко Н. А., Вергелес С. С.	
Эволюция нелинейных волновых импульсов в теории уравнения синус-Гордон Камчатнов А. М.	734

ОБЗОРЫ

Образование и распад автоионизационных состояний — основной механизм неупругих потерь при столкновениях атомов кэВ-энергий	744
..... Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П.	

НЕЛИНЕЙНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НАНОТЕТРАПОДОВ CdTe С НАКОНЕЧНИКАМИ CdSe ПРИ НЕРЕЗОНАНСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ЭКСИТОНОВ

С. Ю. Гаврилов ^{a,*}, А. М. Смирнов ^{a,b}, М. В. Козлова ^a, Р. Б. Васильев ^c,
В. С. Днепровский ^a

^a Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Физический факультет
119991, Москва, Россия

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

^c Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Факультет наук о материалах
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 августа 2022 г.,
после переработки 1 декабря 2022 г.
Принята к публикации 20 декабря 2022 г.

Методом накачки и зондирования выявлены особенности нелинейного поглощения и фотолюминесценции коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe в случае однофотонного нерезонансного возбуждения экситонов. С ростом интенсивности возбуждающего излучения обнаружена и объяснена конкуренция коротковолнового сдвига максимума фотолюминесценции непрямого электронно-дырочного перехода, связанного с увеличением радиуса одномерных экситонов ввиду заполнения экситонных состояний, и длинноволнового сдвига, возникновения которого может быть связано с зарядово-индуцированным эффектом Штарка и локальным нагревом нанотетраподов вследствие экситон-фононного взаимодействия при нерезонансном возбуждении системы.

DOI: 10.31857/S0044451023050012
EDN: BBSJSY

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно исследуются контролируемые оптические и оптоэлектронные свойства полупроводниковых наноструктур ввиду их перспективного использования при создании опто- и наноэлектронных устройств. Помимо сферических квантовых точек, положивших начало развитию физики коллоидных полупроводниковых наноструктур [1], современные методы коллоидного синтеза предоставляют широкие возможности по выращиванию нанокристаллов разнообразных размеров, структур и форм, таких как тетраподы [2], октаподы [3], наногантели [4], нанопластинки [5–7] и наноситки [8]. Форма наноструктур оказывает существенное влияние на спектры поглощения и фо-

толюминесценции (ФЛ) вследствие зависящего от нее зарядово-индуцированного эффекта Штарка [9], воздействия на энергию связи экситонов [10], на локализацию зарядов [11] и на другие особенности физических явлений в наноструктурах. Размер обуславливает ширину запрещенной зоны полупроводниковой наноструктуры: с уменьшением размера происходит увеличение энергетического зазора в полупроводниковой наноструктуре [12]. ФЛ нанотетраподов обладает существенной зависимостью от наличия ионов легирующей примеси, такой как серебро, марганец, медь и другие [13, 14]. Наличие атомов легирующей примеси приводит к возникновению дополнительных энергетических состояний в запрещенной зоне нанокристалла и, следовательно, модифицирует электронные и дырочные релаксационные процессы в кристалле полупроводника [15, 16]. Поскольку при уменьшении размеров наноструктуры растет соотношение числа атомов поверхности к числу атомов в объеме нано-

* E-mail: logbook1@yandex.ru

кристалла, поверхностные состояния оказывают существенное влияние на оптические свойства наноструктур [17, 18], приводя к увеличению времен релаксации ФЛ. Из-за захвата носителей заряда на локализованные поверхностные состояния [19, 20] в результате оже-рекомбинации [21–23] могут образовываться каналы поверхностной безызлучательной и излучательной релаксации [24]. Коллоидный синтез позволяет выращивать гетероструктурные нанокристаллы [25], в том числе второго рода, которые представляют особый интерес из-за эффекта фотоиндуцированного разделения зарядов [4, 26]. Исследуемые полупроводниковые нанотетраподы могут быть использованы при создании высокоэффективных солнечных концентраторов [27, 28], биомаркеров [29, 30], светодиодов [31–33], активных сред лазеров [34, 35] и модуляторов добротности [35, 36].

Одним из основных нелинейных эффектов в полупроводниковых нанотетраподах выделяют эффект насыщения поглощения, который объясняется заполнением фазового пространства экситонов. Целью настоящей работы является определение физических процессов, ответственных за особенности спектров ФЛ и нелинейного изменения поглощения нанотетраподов CdTe/CdSe при нерезонансном возбуждении экситонов наносекундными лазерными импульсами.

2. ИССЛЕДУЕМЫЕ ОБРАЗЦЫ И СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследуемые наноструктуры были выращены методом коллоидной химии [37] и представляют собой нанотетраподы CdTe с наконечниками из CdSe, выращенными избирательно на продолжениях ножек [38]. Длина ножек тетраподов CdTe составляет 12 ± 1 нм, длина рук CdSe — 11 ± 1 нм, диаметр ножек CdTe и наконечников CdSe — около 3 нм (вставка на рис. 1). Растворителем для коллоидного раствора нанотетраподов выбран прозрачный в оптическом диапазоне гексан.

Измеренный спектр пропускания коллоидного раствора нанотетраподов характеризуется длинноволновым хвостом, относящимся к поглощению на непрямом экситонном переходе, и неоднородно уширенными минимумами на длинах волн 570 и 643 нм, относящимися к прямым экситонным переходам в компонентах CdSe и CdTe нанотетрапода CdTe/CdSe соответственно (рис. 1, рис. 2, верхняя панель) [38]. Поглощение на непрямом экситонном переходе слабо выражено ввиду его низкой вероятности по причине необходимости участия в

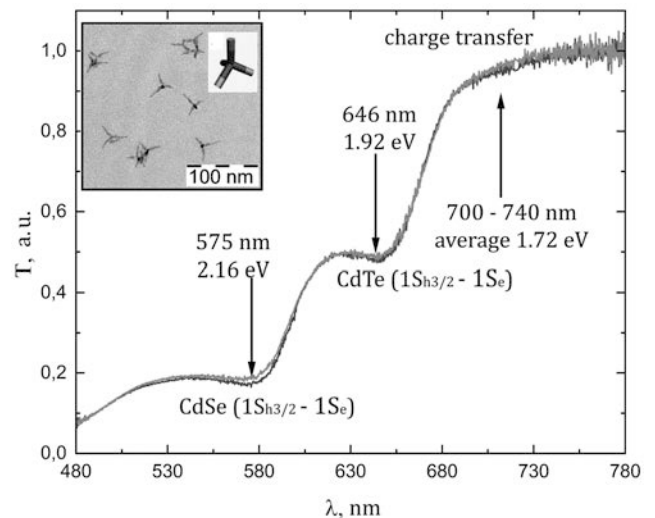


Рис. 1. (В цвете онлайн) Линейный спектр пропускания (черная линия) и нелинейный спектр пропускания при интенсивности накачки 2.1 MBt/cm^2 (красная линия) коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe. На вставке представлено изображение нанотетраподов CdTe/CdSe, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии, и схематичное изображение нанокристаллов, где красным обозначен CdTe, а желтым — CdSe

данном процессе третьей частицы — фонона [39]. Неоднородное уширение связано с дисперсией в размерах нанотетраподов. Кроме этого, нанокристаллы обладают сравнимым по порядку величины однородным уширением ввиду экситон-фононного взаимодействия и принципа неопределенности Гейзенберга [40].

ФЛ и нелинейное изменение поглощения коллоидного раствора нанотетраподов исследованы при квазистационарном возбуждении экситонных переходов третьей гармоникой (360 нм) лазера $\text{Nd}^{3+} : \text{YAlO}_3$ (1080 нм), работающего в режиме модуляции добротности (длительность импульсов $\tau \approx 9$ нс). Интенсивность лазерного воздействия варьировалась в диапазоне от 0.004 до 2.1 MBt/cm^2 . Все измерения проведены при комнатной температуре.

Для исследования коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe был применен метод накачки и зондирования [41]. Зондирование осуществлялось широкополосным (500–800 нм) наносекундным излучением ФЛ красителей Coumarin 7, Kiton Red, Oxazine 720. Время релаксации каждого из красителей на порядок меньше длительности импульса третьей гармоники лазерного излучения. Диапазон длин волн спектров ФЛ красителей целиком перекрывал полосы поглощения основных экситонных переходов в компонентах нанотетраподов (рис. 1). Спектры пропускания и ФЛ на-

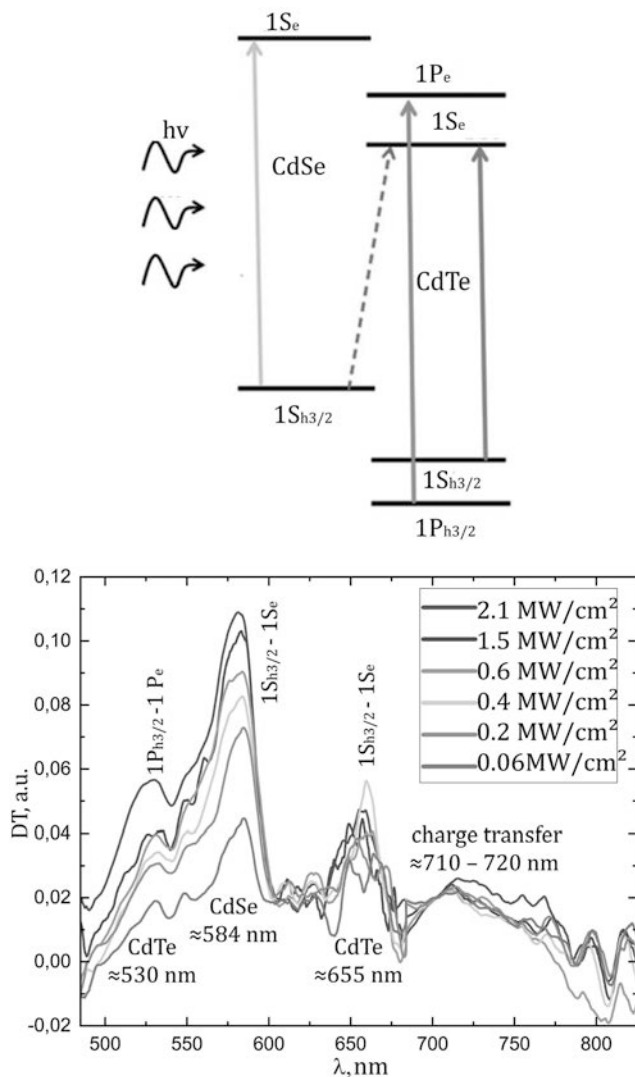


Рис. 2. (В цвете онлайн) Верхняя панель — поглощение света в нанотетраподах CdTe/CdSe: желтой и красной стрелками обозначено поглощение на прямых экситонных переходах $1S_{h3/2} - 1S_e$ в компонентах CdSe и CdTe соответственно; зеленой стрелкой — прямой экситонный переход $1P_{h3/2} - 1P_e$ в компоненте CdTe; бордовой стрелкой — не прямой экситонный переход между уровнями квантования компонент CdSe и CdTe. Нижняя панель — дифференциальные спектры пропускания коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe при различных интенсивностях накачки

нотетраподов CdTe/CdSe были измерены с помощью CCD-камеры, совмещенной с полихроматором SpectraPro 2300. Для формирования зондирующего широкополосного излучения с диаметром пятна меньше диаметра луча накачки была применена оптическая система с коррекцией aberrаций. Оптические пути импульсов накачки и зондирования были выравнены.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Измеренный нелинейный спектр пропускания коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe при интенсивности накачки 2.1 МВт/см^2 представлен на рис. 1. Для определения особенностей нелинейного поглощения слабозапрещенного изменения пропускания основных экситонных переходов в компонентах нанотетрапода и непрямого экситонного перехода были рассчитаны дифференциальные спектры пропускания по формуле

$$DT(\lambda) = \frac{T(\lambda) - T_0(\lambda)}{T_0(\lambda)}, \quad (1)$$

где $T(\lambda)$ и $T_0(\lambda)$ — спектры пропускания возбужденного и невозбужденного коллоидных растворов нанотетраподов соответственно, см. рис. 2. Увеличение пропускания с ростом интенсивности объяснено эффектом заполнения состояний [40].

При воздействии на коллоидный нанотетрапод CdTe/CdSe излучением с энергией фотона, равной 3.44 эВ, возбуждаются высокоэнергетичные электронные и дырочные состояния в компонентах CdTe и CdSe, которые посредством взаимодействия с фононами быстро релаксируют ($\tau \approx 1 \text{ пс}$ [42]) до основных экситонных состояний с энергиями 1.89 и 2.12 эВ соответственно. При этом происходит заполнение уровней $1S_e$ и $1S_{h3/2}$, что приводит к уменьшению поглощения на основных экситонных переходах в компонентах тетрапода CdSe и CdTe ($1S_{h3/2} - 1S_e$), см. рис. 2. Обнаружено просветление и более высокоэнергетичного перехода $1P_{h3/2} - 1P_e$ в компоненте CdTe, что может быть объяснено последовательной релаксацией по уровням квантования электронов и дырок в нанокристалле при их нерезонансном возбуждении фотонами с энергией 3.44 эВ. Кроме этого, выявлены просветление и насыщение поглощения непрямого перехода на длинах волн 710–720 нм во всем диапазоне интенсивностей накачки, используемом в эксперименте (рис. 2, нижняя панель), что связано с заполнением долгоживущих состояний. Для определения интенсивности насыщения основного экситонного перехода в компоненте CdSe была использована полуэмпирическая зависимость амплитуды дифференциального пропускания от интенсивности накачки (рис. 3) [40]:

$$DT(I) = DT_{max} \left(1 - \frac{1}{1 + I/I_s} \right), \quad (2)$$

где DT_{max} — асимптота, к которой стремится амплитуда DT при увеличении накачки. При аппроксимации экспериментальных данных с помощью форму-

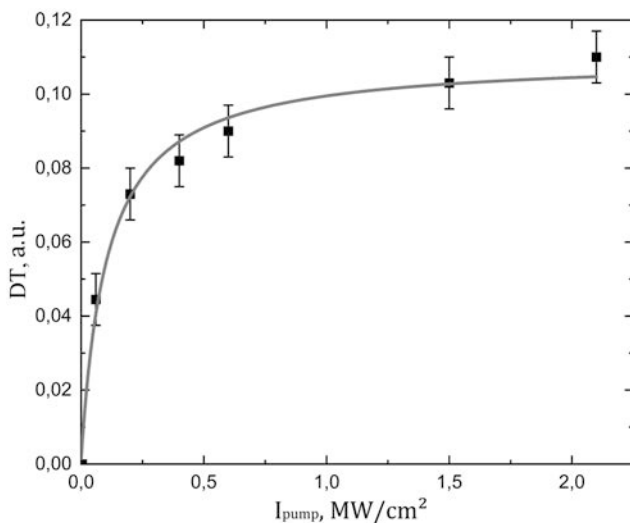


Рис. 3. Зависимость максимума спектра дифференциального пропускания коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe на длине волны основного экситонного перехода в компоненте CdSe (584 нм) от интенсивности накачки

лы (2) была определена интенсивность насыщения поглощения $I_s \approx 0.11$ МВт/см².

По измеренным спектрам ФЛ коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe при различных интенсивностях накачки (рис. 4, нижняя панель) были определены соответствующие максимумам ФЛ основные экситонные переходы в компоненте CdSe (595 нм) и в компоненте CdTe (673 нм). Непрямой экситонный переход при малых интенсивностях возбуждения характеризуется положением максимума ФЛ на длине волны 776 нм, при интенсивности 2.1 МВт/см² смещается до 745 нм. Измеренная зависимость энергии максимума ФЛ прямого экситонного перехода от интенсивности накачки в компоненте CdSe не зависит от интенсивности оптической накачки в исследуемом диапазоне (рис. 5, верхняя панель). Линейная зависимость интенсивности ФЛ от интенсивности накачки для прямого экситонного перехода $1S_{h3/2}-1S_e$ в компоненте CdSe (рис. 5, средняя панель) связана со сравнительно быстрой электронно-дырочной рекомбинацией (0.02–0.04 мкс при комнатной температуре [4, 42]). При этом время рекомбинации непрямых экситонов составляет 0.4–0.7 мкс [4, 43, 44]. Измеренная зависимость интенсивности максимума ФЛ от интенсивности накачки для непрямого экситонного перехода (рис. 5, средняя панель) выходит на насыщение, что объясняется заполнением состояний непрямого экситонного перехода вследствие быстрой релаксации электронов с уровня $1S_e$ в CdSe на уровень $1S_e$ в CdTe и дырок с уровня

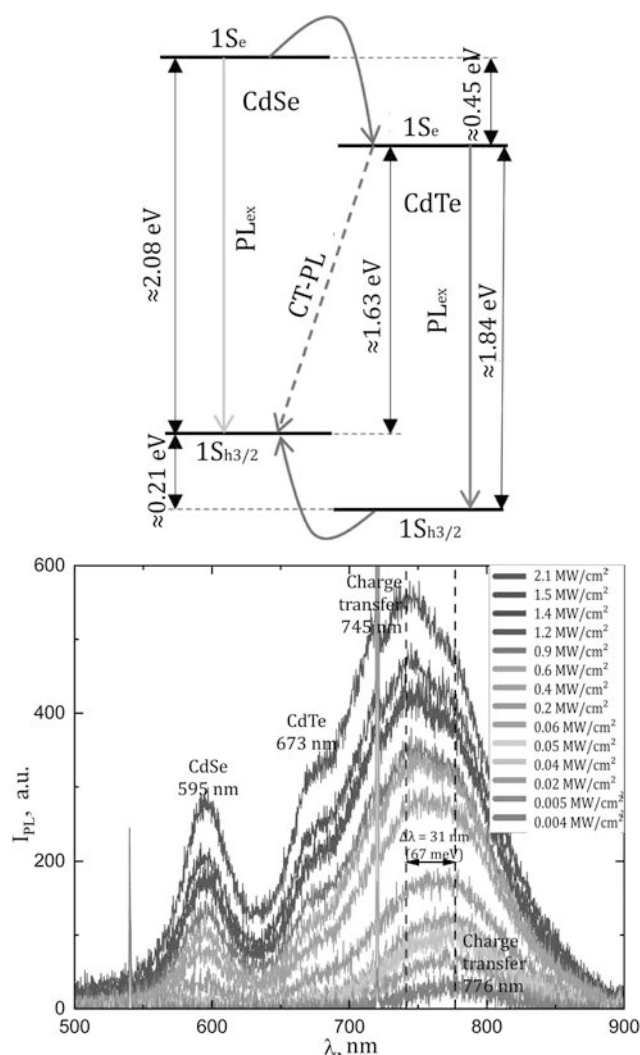


Рис. 4. (В цвете онлайн) Верхняя панель — схема энергетических уровней нанотетраподов CdTe/CdSe. Желтой стрелкой обозначена экситонная ФЛ в компоненте CdSe, красной стрелкой — экситонная ФЛ в компоненте CdTe, красной штриховой стрелкой CT-PL — экситонная ФЛ пространственно-разделенных носителей заряда. Красным обозначен переход электронов и дырок на более низкие энергетические уровни в соседнюю пространственную структуру. Нижняя панель — спектры ФЛ коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe при различных интенсивностях накачки

$1S_{h3/2}$ в CdTe на уровень $1S_{h3/2}$ в CdSe ($\tau \approx 0.01$ нс [42]) (рис. 4, верхняя панель) по сравнению с временами рекомбинации экситонов. Выявлен коротковолновый сдвиг максимума ФЛ непрямого экситонного перехода от интенсивности накачки, который объясняется зависимостью радиуса экситона от экситонной плотности в нанотетраподах (рис. 5, верхняя панель). Увеличение интенсивности накачки вызывает рост экситонной плотности в

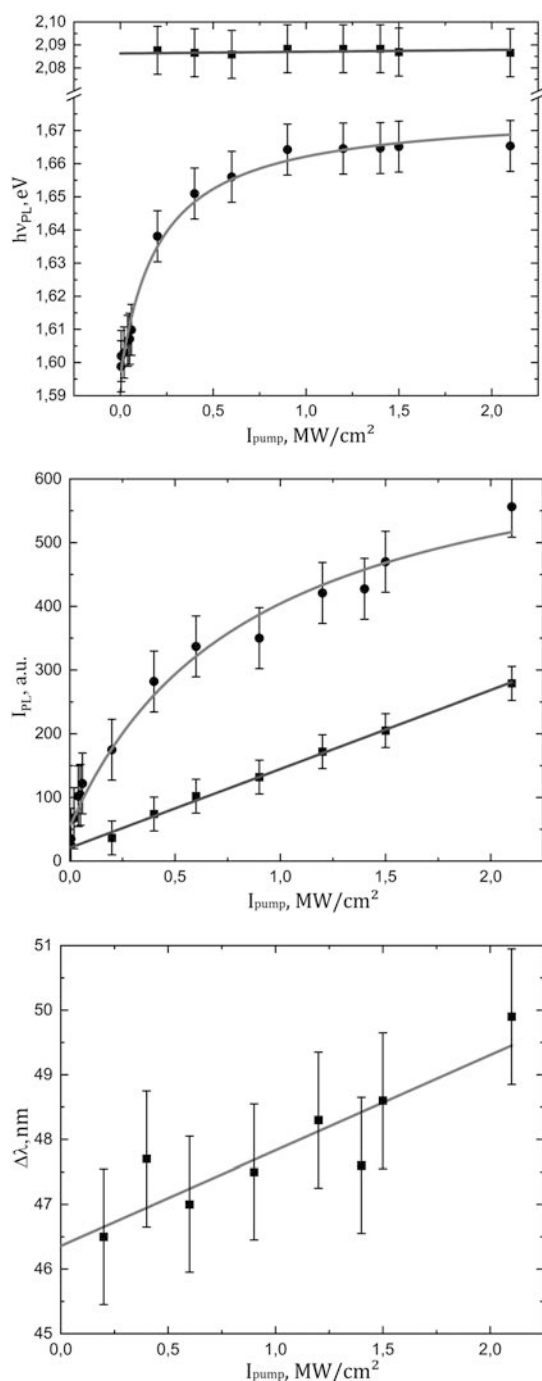


Рис. 5. (В цвете онлайн) Верхняя панель — зависимости энергии максимума ФЛ непрямого экситонного перехода в коллоидном растворе нанотетраподов CdTe/CdSe (красная кривая) и прямого экситонного перехода в компоненте CdSe (синяя прямая) от интенсивности накачки. Средняя панель — зависимости интенсивности максимума ФЛ коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe от интенсивности накачки для непрямого экситонного перехода (красная кривая) и перехода в компоненте CdSe (синяя прямая). Нижняя панель — полуширина пика ФЛ основного экситонного перехода в CdSe от интенсивности накачки

гетероструктуре, что приводит к заполнению фазового пространства экситонов, сопровождающегося увеличением радиуса экситона в протяженных ножках нанотетрапода. Увеличение радиуса экситона приводит к уменьшению энергии связи экситона и увеличению энергии непрямого перехода [10]. Коротковолновый сдвиг максимума ФЛ непрямого экситонного перехода при нерезонансном возбуждении экситонов в нанотетраподах CdTe/CdSe составил примерно 67 мэВ (рис. 5, верхняя панель), что вдвое меньше энергии связи экситонов в одномерной структуре (127 мэВ) [10]:

$$\mathcal{E}_{exc}^{1D} = -\frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_s \varepsilon_I} d} \sqrt{\ln \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_I}}, \quad (3)$$

где d — диаметр ножки тетрапода, e — заряд электрона, ε_s — диэлектрическая проницаемость полупроводника, ε_I — диэлектрическая проницаемость диэлектрика (гексана). Измеренный ранее синий сдвиг ФЛ непрямого экситонного перехода при резонансном возбуждении экситонов в нанотетраподах CdTe/CdSe составил 129 мэВ [38]. Двукратное различие в величине сдвига в случае нерезонансного возбуждения может указывать на наведенный эффект Штарка [41] и локальный нагрев нанокристаллов [45], приводящие к уменьшению энергии электронно-дырочных переходов [45, 46]. В свою очередь, процесс оже-рекомбинации в полупроводниковых нанокристаллах, который, в том числе, протекает при захвате дырок на поверхность [21–23] и вызывает ФЛ дефектов [24], оказывается ответственным за формирование как наведенного эффекта Штарка, так и дополнительного канала безызлучательной релаксации, который может приводить к существенному нагреву нанокристаллов.

Обнаруженное уширение пика ФЛ прямого экситонного перехода в компоненте CdSe от интенсивности накачки (рис. 5, нижняя панель) может указывать на экситон-фононное взаимодействие [47], вызывающее нагрев нанотетраподов [48]. Безызлучательные процессы релаксации электронов и дырок при нерезонансном возбуждении нанотетраподов приводят к образованию оптических фононов, вследствие которого проявляется столкновительное уширение спектральных линий в кристалле [40].

4. ВЫВОДЫ

Выявлены особенности спектров ФЛ и нелинейного поглощения коллоидного раствора нанотетраподов CdTe/CdSe при нерезонансном возбуждении

экситонов наносекундными лазерными импульсами. При увеличении оптической накачки происходит уменьшение поглощения на прямых экситонных переходах в компонентах CdTe и CdSe коллоидного раствора нанотетрапедов CdTe/CdSe вследствие эффекта заполнения экситонных состояний. Увеличение интенсивности возбуждения приводит к значительному коротковолновому сдвигу максимума ФЛ непрямого экситонного перехода (67 мэВ), который объяснен зависимостью радиуса экситонов от экситонной плотности в квазиодномерных отростках нанотетрапедов. С увеличением радиуса экситонов происходит уменьшение энергии связи экситонов, что приводит к увеличению энергии непрямого перехода. Кроме того, коротковолновый сдвиг максимума ФЛ непрямого экситонного перехода может конкурировать с красным сдвигом, который связан как с индуцированным эффектом Штарка, так и нагревом нанотетрапедов.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (РНФ) №18-72-10002 (Измерения и анализ спектров ДТ, раздел обсуждения) и гранта Президента РФ для молодых ученых МД-781.2021.1 (Характеристика спектров линейного поглощения). Мы также благодарим за поддержку научно-образовательную школу Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Matijević and W. D. Murphy, *J. Colloid and Interface Sci.* **86**, 476 (1982).
2. A. Fiore, R. Mastria, M. G. Lupo et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **131**, 2274 (2009).
3. S. Deka, K. Miszta, D. Dorfs et al., *Nano Lett.* **10**, 3770 (2009).
4. S. Kumar, M. Jones, S. S. Lo, and G. D. Scholes, *Small* **3**, 1633 (2007).
5. S. Ithurria and B. Dubertret, *J. Amer. Chem. Soc.* **130**, 16504 (2008).
6. A. M. Smirnov, V. N. Mantsevich, D. S. Smirnov et al., *Sol. St. Comm.* **299**, 113651 (2008).
7. A. M. Smirnov, A. D. Golinskaya, B. M. Saidzhonov et al., *J. Luminescence* **229**, 117682 (2021).
8. A. S. Baimuratov, Y. K. Gun'ko, A. G. Shalkovskiy et al., *Adv. Opt. Mater.* **5**, 1600982 (2017).
9. C. Heyn, L. Ranasinghe, M. Zocher, and W. Hansen, *J. Phys. Chem. C* **124**, 19809 (2020).
10. L. V. Keldysh, *Phys. Stat. Sol. (a)* **164**, 3 (1997).
11. S. Malkmus, S. Kudera, L. Manna et al., *J. Phys. Chem. B* **110**, 17334 (2006).
12. D. J. Norris and M. G. Bawendi, *Phys. Rev. B* **53**, 16338 (1996).
13. P. A. Kotin, S. S. Bubenov, T. A. Kuznetsova, and S. G. Dorofeev, *Mendelev Comm.* **25**, 372 (2015).
14. Y. Yang, Y. Jin, H. He et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **132**, 13381 (2010).
15. A. M. Smirnov, A. D. Golinskaya, P. A. Kotin et al., *J. Luminescence* **213**, 29 (2019).
16. A. M. Smirnov, A. D. Golinskaya, P. A. Kotin et al., *J. Phys. Chem. C* **123**, 27986 (2019).
17. S. Dayal and C. Burda, *J. Amer. Chem. Soc.* **129**, 7977 (2007).
18. S. F. Wuister, A. van Houselt, C. de Mello Donega et al., *Angew. Chem., Int. Ed.* **43**, 3029 (2004).
19. M. Nirmal, C. B. Murray, and M. G. Bawendi, *Phys. Rev. B* **50**, 2293 (1994).
20. Y. Wang, A. Suna, J. McHugh et al., *J. Chem. Phys.* **92**, 6927 (1990).
21. P. A. Frantsuzov and R. A. Marcus, *Phys. Rev. B* **72**, 155321 (2005).
22. A. Katsaba, V. Fedyanin, S. Ambrozevich et al., *Semiconductors* **47**, 1328 (2013).
23. M. S. Zabolotskii, A. V. Katsaba, S. A. Ambrozevich et al., *Phys. Stat. Sol. (RRL)* **14**, 2000167 (2020).
24. A. V. Katsaba, S. A. Ambrozevich, V. V. Fedyanin et al., *J. Luminescence* **214**, 116601 (2019).
25. M. A. Hines and P. Guyot-Sionnest, *J. Phys. Chem.* **100**, 468 (1996).
26. A. Vitukhnovsky, A. Shul'ga, S. Ambrozevich et al., *Phys. Lett. A* **373**, 2287 (2009).
27. H. Lee, S. W. Yoon, J. P. Ahn et al., *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93**, 779 (2009).
28. H. Lee, S. Kim, W. S. Chung et al., *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **95**, 446 (2011).
29. D. Bera, L. Qian, T. K. Tseng, and P. H. Holloway, *Materials (Basel)* **3**, 2260 (2010).
30. N. Thondavada, R. Chokkareddy, N. V. Naidu, and G. G. Redhi, in *Nanomaterials in Diagnostic Tools and Devices*, ed. by S. Kanchi and D. Sharma, Elsevier Sci. Publ., Amsterdam (2020), p. 417.

31. F. Chen, Q. Lin, H. Shen, and A. Tang, *Mater. Chem. Frontiers* **4**, 1340 (2020).
32. Z. Chen, B. Nadal, B. Mahler et al., *Adv. Funct. Mater.* **24**, 295 (2014).
33. R. B. Vasiliev, D. N. Dirin, M. S. Sokolikova et al., *Mendeleev Comm.* **19**, 128 (2009).
34. Y. S. Park, J. Roh, B. T. Diroll et al., *Nature Rev. Mater.* **6**, 382 (2021).
35. N. M. Radzi, A. A. Latif, M. F. Ismail et al., *Results Phys.* **16**, 103123 (2020).
36. B. Xu, S. Luo, X. Yan et al., *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **23** (5), art. No. 1900507 (2017).
37. R. B. Vasiliev, D. N. Dirin, M. S. Sokolikova et al., *J. Mater. Res.* **26**, 1621 (2011).
38. A. D. Golinskaya, A. M. Smirnov, M. V. Kozlova et al., *Results Phys.* **27**, 104488 (2021).
39. E. Groeneveld and C. de Mello Donegá, *J. Phys. Chem. C* **116**, 16240 (2012).
40. O. Svelto, *Principles of Lasers*, Springer, New York (2010).
41. А. М. Смирнов, А. Д. Голинская, К. В. Ежова, *ЖЭТФ* **152**, 1046 (2017).
42. P. Peng, D. J. Milliron, S. M. Hughes et al., *Nano Lett.* **5**, 1809 (2005).
43. A. Granados del Aguila, E. Groeneveld, J. C. Maan et al., *ACS Nano* **10**, 4102 (2016).
44. C. de Mello Donegá, *Phys. Rev. B* **81**, 165303 (2010).
45. B. Chon, J. Bang, J. Park et al., *J. Phys. Chem. C* **115**, 436 (2011).
46. G. W. Wen, J. Y. Lin, H. X. Jiang, and Z. Chen, *Phys. Rev. B* **52**, 5913 (1995).
47. B. Yu, C. Zhang, L. Chen et al., *J. Chem. Phys.* **154**, 214502 (2021).
48. G. Morello, M. De Giorgi, S. Kudera et al., *J. Phys. Chem. C* **111**, 5846 (2007).

РАСПАД СКАЛЯРОНА В ПЕРТУРБАТИВНОЙ КВАНТОВОЙ ГРАВИТАЦИИ

Б. Н. Латош ^{a,b*}

^a *Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия*

^b *Государственный Университет “Дубна”
141982, Дубна, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 5 октября 2022 г.,
после переработки 3 ноября 2022 г.
Принята к публикации 9 ноября 2022 г.

Модель квадратичной гравитации Старобинского описывает успешный инфляционный сценарий. Инфляция происходит из-за новой скалярной степени свободы, называемой скаляроном. После окончания инфляции скалярон распадается на материальные степени свободы и степени свободы темной материи и производит разогрев Вселенной. Мы изучаем новые каналы, по которым скалярон может передавать энергию в сектор материи. Эти каналы представляют собой аннигиляцию и распад через промежуточные состояния гравитонов. Результаты получены в рамках пертурбативной квантовой гравитации. В пределе тяжелого скалярона через аннигиляционный канал рождаются преимущественно скалярные частицы. При этом допускается распад в любые типы частиц. В пределе легкого скалярона канал распада сильно подавлен. Ожидается, что рождение бозонов по каналу аннигиляции будет преобладать на ранних стадиях разогрева, тогда как рождение фермионов будет доминировать на более поздних стадиях.

DOI: 10.31857/S0044451023050024

EDN: BBVSSE

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель модифицированной гравитации $R + R^2$ занимает особое место среди моделей модифицированной гравитации. Во-первых, она не содержит духовых степеней свободы несмотря на наличие высших производных [1, 2]. Во-вторых, она имеет одну дополнительную скалярную степень свободы, которую можно выделить явно при помощи конформного отображения на скалярно-тензорную гравитацию [2–6]. Самое главное, модель описывает инфляционный сценарий, полностью согласованный с данным наблюдений [7–11].

Широко изучались возможности описания постинфляционного разогрева в рамках модели $R + R^2$. Возможно, простейший сценарий основан на превращениях новой гравитационной степени свободы – скалярона [12–16]. Скалярон обеспечивает проте-

вание инфляции в режиме медленного скатывания, скользя по плоской части потенциала. Когда инфляция заканчивается, скалярон начинает колебаться вокруг минимума потенциала. Эти колебания приводят к интенсивному образованию частиц, которые разогревают Вселенную. Если скалярон имеет каналы, по которым он может переходить в другие степени свободы, то соответствующие факторы, такие как сечение аннигиляции или ширина распада, естественным образом войдут в космологические уравнения и будут играть роль эффективного трения, подавляющего осцилляции скалярона. Точный механизм, ответственный за трансмутации скалярона, сильно зависит от модели.

Мы рассмотрим два аспекта такого постинфляционного разогрева. В первую очередь, скалярон может аннигилировать в степени свободы материи (или темной материи) через промежуточные гравитонные состояния. Такая аннигиляция возможна, потому что все типы материи, включая скалярон, взаимодействуют с гравитацией. Такие процессы можно последовательно описать в рамках пертурбативной квантовой гравитации и рассчитать соот-

* E-mail: latosh@theor.jinr.ru

ветствующие сечения аннигиляции. Вклад этого канала в разогрев обсуждается ниже. Во-вторых, скалярон может распадаться непосредственно на степени свободы материи, потому что он взаимодействует с тензором энергии-импульса материи. Он получает новый канал распада на однопетлевом уровне, так как также может аннигилировать через промежуточные гравитационные состояния. Мы приведем конкретные примеры таких процессов и обсудим их вклад в разогрев.

Статья организована следующим образом. Во-первых, мы обсудим формализм, используемый для вычислений. Мы покажем, что после окончания инфляции слабые квантовые гравитационные эффекты можно согласовано описать в рамках пертурбативной квантовой гравитации. Мы кратко обсудим ее формализм и применимость в разд. 2. В разд. 3 мы обсуждаем аннигиляцию скалярона в материальные степени свободы. Для простоты мы рассматриваем только распады в состояния с $s = 0$, $m \neq 0$, которые подобны состояниям бозона Хиггса; состояния с $s = 1/2$, $m \neq 0$, которые подобны кваркам, лептонам и легкой темной материи; и состояния $s = 1$, $m = 0$, которые подобны глюонам и фотонам. В разд. 4 мы строим явные примеры скалярных распадов в материальные степени свободы, которые существуют только на однопетлевом уровне. Также мы обсуждаем их роль в постинфляционном разогреве. В разд. 5 приведены выводы.

2. ПЕРТУРБАТИВНАЯ КВАНТОВАЯ ГРАВИТАЦИЯ

Пертурбативная квантовая гравитация представляет простой формализм, способный согласованно учитывать квантовые гравитационные эффекты [17–21]. Подход основан на следующих предположениях. Во-первых, построенная теория является эффективной. Это означает, что она применима при энергиях ниже планковского масштаба, и ее не следует пытаться расширять далее в ультрафиолетовую область. Во-вторых, гравитация пертурбативна. Это означает, что теория учитывает только гравитационные эффекты, описываемые малыми метрическими возмущениями.

На практике эти предположения реализуются следующим образом. Метрика полного пространства-времени $g_{\mu\nu}$ составляется из плоского фона $\eta_{\mu\nu}$ и его малых возмущений $h_{\mu\nu}$:

$$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + \kappa h_{\mu\nu}. \quad (1)$$

Тут κ — гравитационная постоянная, связанный с постоянной Ньютона G_N следующим образом:

$$\kappa^2 = 32\pi G_N. \quad (2)$$

В некотором смысле $h_{\mu\nu}$ играет роль калибровочного поля со спином 2, распространяющегося на плоском фоне. Квантовая динамика системы описывается соответствующим производящим функционалом

$$\mathcal{Z}[J^{\mu\nu}] = \int \mathcal{D}[h_{\alpha\beta}] \exp[i\mathcal{A}[h_{\alpha\beta}] + iJ^{\mu\nu}h_{\mu\nu}]. \quad (3)$$

Здесь $\mathcal{A}$ — микроскопическое действие, описывающее используемую гравитационную модель. Действие $\mathcal{A}$ следует разложить в пертурбативный ряд по $h_{\mu\nu}$, порождая бесконечный ряд:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & -\frac{1}{2}h_{\mu\nu}\mathcal{P}^{\mu\nu\alpha\beta}\Box h_{\alpha\beta} + \\ & + \kappa\hat{\mathcal{V}}_3^{\mu_1\nu_1\mu_2\nu_2\mu_3\nu_3}h_{\mu_1\nu_1}h_{\mu_2\nu_2}h_{\mu_3\nu_3} + \\ & + \kappa^2\hat{\mathcal{V}}_4^{\mu_1\nu_1\mu_2\nu_2\mu_3\nu_3\mu_4\nu_4}h_{\mu_1\nu_1}h_{\mu_2\nu_2}h_{\mu_3\nu_3}h_{\mu_4\nu_4} + \\ & + \mathcal{O}(\kappa^3). \end{aligned} \quad (4)$$

Первый член разложения описывает пропагатор гравитона, а члены $\hat{\mathcal{V}}_n$ соответствуют вершинам взаимодействия гравитонов. Следует отметить, что это разложение содержит бесконечное число членов взаимодействия, последовательно подавляемых планковским масштабом.

Построенная таким теория неперенормируема [17, 22, 23]. В рамках обсуждаемого подхода отсутствие перенормируемости объясняется конечностью области применимости. Применение стандартной процедуры перенормировки для пертурбативной гравитации потребовало бы бесконечного числа перенормировочных констант. Это лишь показывает, что данные о поведении гравитации при высоких энергиях отсутствуют в построенной теории, что уже обеспечено ограничением на область ее применимости.

Несмотря на эти недостатки, теория предоставляет согласованный и контролируемый способ вычисления амплитуд. В любом порядке по теории возмущений нужно определить набор релевантных взаимодействий и построить соответствующий им набор диаграмм Фейнмана, дающих вклад в вычисляемый матричный элемент. Правила Фейнмана для взаимодействия гравитона и материи, составляющие основу теории, могут быть построены аналитически [24–26]. В статье [27] был предложен алгоритм вычисления правил Фейнмана для гравитации. Он

был реализован в пакете FeynGrav, который расширяет FeynCalc [27–29]. В этой статье все расчеты выполнены с помощью FeynGrav.

Пертурбативный подход можно использовать для изучения квантовых гравитационных эффектов после окончания инфляционной фазы. Прежде всего, можно утверждать, что все процессы со степенями свободы скалярона, материи и темной материи в постинфляционной Вселенной происходят на временном масштабе, намного меньшем, чем масштаб космологического расширения. Иными словами, такие процессы хорошо локализованы как в пространстве, так и во времени, поэтому их можно отделить от космологического фона и учитывать лишь малые локальные возмущения метрики, описываемые теорией возмущений. Во-вторых, модель гравитации $R + R^2$ однозначно соответствует известной скалярно-тензорной модели гравитации [1, 2]. В скалярно-тензорной параметризации лагранжиан модели диагонален, что позволяет использовать стандартный формализм, свободный от высших производных.

Таким образом, пертурбативный подход к квантовой гравитации предоставляет согласованный и контролируемый способ вычисления квантовых гравитационных эффектов. Нет препятствий для его последовательного применения в постинфляционной Вселенной для использования для изучения процессов, связанных со степенями свободы гравитации, скалярона, материи и темной материи.

3. АННИГИЛЯЦИЯ СКАЛЯРОНА

Обратимся к обсуждению аннигиляции скалярона в материальные степени свободы. Рассмотрим аннигиляцию пары скаляронов (являющихся скалярами с массой M) в легкие скаляры $s = 0$, $0 < m \ll M$; легкие дираковские фермионы $s = 1/2$, $0 < m_f \ll M$; безмассовые векторы $s = 1$, $m_v = 0$. Выбор этих процессов обусловлен тем, что такие степени свободы могут быть связаны как со степенями свободы стандартной модели, так и со степенями свободы темной материи. А именно, легкие скаляры подобны бозону Хиггса, фермионные степени свободы подобны кварками и лептонами, а безмассовые векторные степени свободы можно ассоциировать либо с фотонами, либо с глюонами.

В этом разделе, во-первых, будут вычислены все обсуждаемые амплитуды и соответствующие сечения. После этого будет проведен анализ того, к каким физическим последствиям приводят эти ре-

зультаты. Все расчеты проводятся с помощью пакетов “FeynCalc” [28, 29], “FeynGrav” [27], “Package-X” [30, 31] и FeynHelpers [32]. Соответствующие публикации содержат подробные описания их использования, поэтому мы не будем их в данной статье.

Кинематика таких аннигиляционных процессов определяется следующим образом:

$$\begin{cases} p_1^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{M^2 + p^2} & 0 & 0 & p \end{pmatrix}, \\ p_2^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{M^2 + p^2} & 0 & 0 & -p \end{pmatrix}, \\ q_1^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2 + q^2} & q \sin \theta & 0 & q \cos \theta \end{pmatrix}, \\ q_2^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2 + q^2} & -q \sin \theta & 0 & -q \cos \theta \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (5)$$

$$q = \sqrt{M^2 + p^2 - m^2},$$

$$\begin{cases} s = (p_1 + p_2)^2 = 4(M^2 + p^2), \\ t = (p_1 - q_1)^2 = -(p + q)^2 + 4pq \cos^2 \frac{\theta}{2}, \\ u = (p_1 - q_2)^2 = -(p + q)^2 + 4pq \sin^2 \frac{\theta}{2}. \end{cases}$$

Здесь p_1 и p_2 обозначают входящие импульсы скаляронов на оболочке; q_1 и q_2 обозначают исходящие импульсы рожденных частиц; p — пространственный импульс центра масс; m — масса рожденных степеней свободы; s , t и u обозначают стандартные переменные Мандельштама [33, 34].

Заданный аннигиляционный матричный элемент $\mathcal{M}$ связан с дифференциальным сечением стандартной формулой:

$$d\sigma = \frac{1}{j} |\mathcal{M}|^2 (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_1 + p_2 - q_1 - q_2) \times \\ \times \frac{1}{2E(p_1)} \frac{1}{2E(p_2)} \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3 2E(q_1)} \frac{d^3 q_2}{(2\pi)^3 2E(q_2)}. \quad (6)$$

Здесь j обозначает фактор, нормирующий сечение на единичный поток:

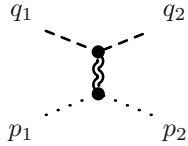
$$\frac{1}{j} = \left(\frac{\sqrt{p_1 \cdot p_2 - M^2 M^2}}{p_1^0 p_2^0} \right)^{-1} = \frac{M^2 + p^2}{\sqrt{(M^2 + 2p^2)^2 - M^4}}. \quad (7)$$

Другие факторы нормируют свободные начальные и конечные состояния и выполняют интегрирование по фазовому пространству двух тел. Эта формула очень подробно обсуждается в классических учебниках [35–37]. Для данного случая формула приводит к следующей связи между матричным элементом и дифференциальным сечением:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{256\pi^2} \frac{1}{M} \frac{1}{p} \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2}}{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2} |\mathcal{M}|^2. \quad (8)$$

Здесь $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ обозначает телесный угол.

Аннигиляция двух скаляронов в два легких скаляра с массой $0 < m \ll M$ задается следующим матричным элементом:



$$= \mathcal{M}_{SS \rightarrow SS} =$$

$$= i \frac{\kappa^2}{4} \frac{1}{s} \left[tu - (M^2 + m^2)(t + u) + m^4 + M^4 + 4m^2 M^2 \right]. \quad (9)$$

Здесь и далее в этом разделе используются обозначения (5). Следовательно, p_1 и p_2 обозначают входящие импульсы скаляронов на массовой оболочке, q_1 и q_2 обозначают исходящие импульсы скаляров на оболочке, и эти импульсы подчиняются закону сохранения $p_1 + p_2 = q_1 + q_2$. Амплитуда дает дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma_{SS \rightarrow SS}}{d\Omega} = \frac{1}{16} (GM)^2 \frac{M}{p} \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2}}{\left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^3} \times$$

$$\times \left[\left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right) \left(2 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 + \left(\frac{m}{M}\right)^2\right) - \left(\frac{p}{M}\right)^2 \left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2\right) \cos 2\theta \right]^2. \quad (10)$$

Полное сечение выражается формулой

$$\sigma_{SS \rightarrow SS} = \frac{\pi}{60} (GM)^2 \frac{M}{p} \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2}}{\left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^3} \times$$

$$\times \left[15 \left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right)^2 \left(2 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 + \left(\frac{m}{M}\right)^2\right)^2 + 10 \left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right) \left(2 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 + \left(\frac{m}{M}\right)^2\right) \times \right.$$

$$\times \left(\frac{p}{M}\right)^2 \left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2\right) + \left. 7 \left(\frac{p}{M}\right)^4 \left(1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m}{M}\right)^2\right)^2 \right]. \quad (11)$$

Полезно разложить сечение (11) в ряд по малой массе $m \ll M$ и малому импульсу $p \ll M$:

$$\sigma_{SS \rightarrow SS} = \frac{\pi}{15} (GM)^2 \frac{M}{p} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2}} \times$$

$$\times \left[15 + 20 \left(\frac{p}{M}\right)^2 + 8 \left(\frac{p}{M}\right)^4 \right] + \mathcal{O} \left(\frac{m^2}{M^2} \right) =$$

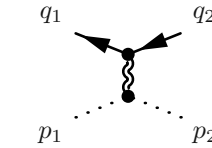
$$= \frac{\pi}{4} (GM)^2 \frac{M}{p} \sqrt{1 - \left(\frac{m}{M}\right)^2} \left[2 + \left(\frac{m}{M}\right)^2 \right]^2 +$$

$$+ \mathcal{O} \left(\frac{p}{M} \right) =$$

$$= \left[\pi (GM)^2 \frac{M}{p} + \mathcal{O} \left(\frac{m^2}{M^2} \right) \right] + \mathcal{O} \left(\frac{p}{M} \right). \quad (12)$$

Мы подробно обсудим этот результат ниже, в конце этого раздела. Для начала мы укажем только две особенности сечения (11). Во-первых, сечение имеет гладкий предел при $m \rightarrow 0$, поэтому его можно использовать для безмассовых скаляров. Во-вторых, сечение ожидаемо сингулярно в пределе $p \rightarrow 0$. И матричный элемент (9), и поперечное сечение (11) вычислены в системе центра масс. Предел $p \rightarrow 0$ соответствует ситуации, когда частицы не сближаются и не участвуют во взаимодействии, поэтому справедливо ожидать, что соответствующий матричный элемент будет сингулярным.

Аннигиляция двух скаляронов в два легких дираковских фермиона с массой $0 < m_f \ll M$ задается матричным элементом



$$= \mathcal{M}_{SS \rightarrow f\bar{f}} =$$

$$= u(q_1) \left[i \frac{\kappa^2}{16} \frac{1}{s} (s + 2M^2)(\hat{q}_1 + \hat{q}_2 + 4m_f) \right] v(q_2). \quad (13)$$

Здесь используются те же обозначения для импульсов, а $u(q)$, $v(q)$ обозначают спиноры, описывающие поляризацию внешних фермионных состояний. Соответствующее дифференциальное сечение задано формулой

$$\frac{d\sigma_{SS \rightarrow f\bar{f}}}{d\Omega} = \frac{1}{2} (GM)^2 \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 \frac{M}{p} \times$$

$$\times \frac{\left[3 + 2 \left(\frac{p}{M}\right)^2 \right]^2 \left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 \right]^{\frac{3}{2}}}{\left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 \right]^3}. \quad (14)$$

Здесь производится суммирование по всем внешним фермионным поляризациям. Полное сечение находится по следующей формуле:

$$\sigma_{SS \rightarrow f\bar{f}} = 2\pi (GM)^2 \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 \frac{M}{p} \times$$

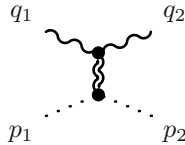
$$\times \frac{\left[3 + 2\left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^2 \left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2 - \left(\frac{m_f}{M}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}}{\left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^3}. \quad (15)$$

Вклады в первом порядке по малой массе $m_f \ll M$ и малому импульсу $p \ll M$ выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_{SS \rightarrow \bar{f}f} &= \\ &= 2\pi(GM)^2 \frac{M}{p} \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 \frac{\left[3 + 2\left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^2}{\left[1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}} + \mathcal{O}\left(\frac{m_f^4}{M^4}\right) = \\ &= 18\pi(GM)^2 \frac{M}{p} \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{m_f}{M}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}\left(\frac{p}{M}\right) = \\ &= \left[18\pi(GM)^2 \frac{M}{p} \left(\frac{m_f}{M}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{p}{M}\right)\right] + \mathcal{O}\left(\frac{m_f^4}{M^4}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

В полной аналогии с предыдущим случаем сечение сингулярно в пределе $p \rightarrow 0$ и допускает гладкий предел $m_f \rightarrow 0$. В отличие от предыдущего случая, сечение обращается в нуль, если $m_f = 0$, поэтому безмассовые фермионы по этому механизму не рождаются.

Наконец, амплитуда, описывающая аннигиляцию двух скаляронов в пару безмассовых векторов, выглядит следующим образом:



$$= \mathcal{M}_{SS \rightarrow VV}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{SS \rightarrow VV} &= \left(i \frac{\kappa^2}{4} \frac{1}{s}\right) \varepsilon_{\sigma_1}^*(q_1) \varepsilon_{\sigma_2}^*(q_2) \times \\ &\times \left[M^4 \eta^{\sigma_1 \sigma_2} + M^2 \left\{ (s - t - u) \eta^{\sigma_1 \sigma_2} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - q_1^{\sigma_1} q_1^{\sigma_2} - q_2^{\sigma_1} q_2^{\sigma_2} - 4 q_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} \right\} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} (s^2 - t^2 - u^2) \eta^{\sigma_1 \sigma_2} + s \{ p_1^{\sigma_1} p_2^{\sigma_2} + p_1^{\sigma_2} p_2^{\sigma_1} + q_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} \} + \right. \\ &\quad \left. + t (p_1^{\sigma_1} q_1^{\sigma_2} + p_2^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1}) + u (p_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} + p_2^{\sigma_1} q_1^{\sigma_2}) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Кинематика (5) допускает гладкий предел $m \rightarrow 0$, поэтому мы применяем его для этого случая и используем те же обозначения. Здесь $\varepsilon_\sigma(q)$ обозначают векторы поляризации, описывающие поляриза-

ции свободных векторных состояний. Соответствующее дифференциальное сечение задано следующей формулой:

$$\frac{d\sigma_{SS \rightarrow VV}}{d\Omega} = \frac{1}{2} (GM)^2 \frac{\left(\frac{p}{M}\right)^3}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2}} \sin^4 \theta. \quad (19)$$

Производится суммирование по всем внешним векторным поляризациям. Полное сечение находится по формуле

$$\begin{aligned} \sigma_{SS \rightarrow VV} &= \frac{16}{15} \pi (GM)^2 \frac{\left(\frac{p}{M}\right)^3}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{M}\right)^2}} = \\ &= \frac{16}{15} \pi (GM)^2 \left(\frac{p}{M}\right)^3 + \mathcal{O}\left(\frac{p^5}{M^5}\right). \end{aligned} \quad (20)$$

Сечение (20) не обращается в нуль для безмассовых векторных бозонов, как в случае безмассовых скалярных бозонов. В то же время сечение регулярно в пределе $p \rightarrow 0$ и обращается в нуль.

Обсудим физические следствия полученных сечений (11), (15) и (20). Результаты сильно зависят от иерархии масс. Полученные сечения явно содержат отношения масс, но влияние иерархии масс этим не ограничивается. Полная энергия поля инфлатона в конце инфляции конечна, и ее значение может быть ограничено при помощи данных о современной Вселенной. Следовательно, если инфлатон тяжелый, то есть его масса лежит в планковской области, то в конце инфляции Вселенная будет заполнена небольшим числом нерелятивистских скаляронов (частиц поля скалярона). Напротив, если инфлатон легкий и его масса примерно равна массе топ кварка, то в конце инфляции Вселенная будет заполнена большим количеством релятивистских скаляронов. В случае тяжелого инфлатона отношения масс m/M , m_f/M вместе с фактором p/M малы. В случае легкого инфлатона отношения масс m/M , m_f/M могут быть порядка единицы, а p/M может быть большими. Рассмотрение этих предельных случаев позволяет сделать исчерпывающие выводы о роли обсуждаемых процессов в разогреве.

Начнем со случая тяжелого скалярона. В этом случае главные вклады в обсуждаемые сечения аннигиляции даны выражениями

$$\begin{aligned} \sigma_{SS \rightarrow ss} &= \frac{1}{16} \sigma_0 \frac{M}{p}, \\ \sigma_{SS \rightarrow \bar{f}f} &= 0, \\ \sigma_{SS \rightarrow VV} &= 0. \end{aligned} \quad (21)$$

В этих выражениях

$$\sigma_0 \stackrel{\text{def}}{=} \pi(4GM)^2 \quad (22)$$

обозначает характерное сечение, равное поверхности плоского диска радиусом $4GM$, что является гравитационным радиусом черной дыры с массой $2M$. Как было отмечено выше, рождение фермионов сильно подавляется фактором $(m_f/M)^2$ и эффективно обращается в нуль независимо от импульсного фактора p/M . Рождение безмассовых векторов свободно от массовых множителей, но подавлено импульсным множителем $(p/M)^3$, поэтому оно также обращается в нуль в пределе тяжелого скалярона. Следовательно, в пределе тяжелого скаляра эффективно рождаются только скалярные частицы.

В пределе легкого скалярона главные вклады даются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \sigma_{SS \rightarrow ss} &= \frac{1}{30} \sigma_0 \left(\frac{p}{M} \right)^2, \\ \sigma_{SS \rightarrow \tilde{f}\tilde{f}} &= \frac{1}{2} \sigma_0, \\ \sigma_{SS \rightarrow v\bar{v}} &= \frac{1}{15} \sigma_0 \left(\frac{p}{M} \right)^2. \end{aligned} \quad (23)$$

В этом случае все сечения не обращаются в нуль, но ведут себя по разному. Рождение фермионов достигает некоторого предельного значения и дальше не растет. Рождение бозонов, напротив, растет квадратично с импульсом центра масс p . Следовательно, в пределе легкого скалярона рождение фермионов не прекращается, но все же подавляется, а скалярные и векторные степени свободы рождаются в равных количествах. Отметим, что сечение рождения векторов больше, чем сечение рождения скаляров. Это связано с тем, что сечение рождения векторов учитывает две поляризации векторных бозонов. По этой причине мы предпочитаем говорить, что обсуждаемые бозонные степени свободы производятся в равных количествах.

Следует отметить, что эти выводы нельзя прямо переносить на сценарий постинфляционного разогрева по следующей причине. Из общих соображений можно установить, что плотность скалярона n подчиняется уравнению Зельдовича–Ли–Вайнберга [38, 39]:

$$\dot{n} + 3Hn + \langle \sigma_{\text{annihilation}} v \rangle (n^2 - n_0^2) = 0. \quad (24)$$

Здесь H обозначает параметр Хаббла, $v = p/M$ — скорость в системе центра масс, n_0 обозначает равновесную плотность скалярона, а $\langle \cdot \rangle$ — тепловое среднее (см. [16] для более подробного обзора). В обсуждаемом сценарии разогрева $\sigma_{\text{annihilation}}$

должны учитывать все каналы аннигиляции. Наши результаты позволяют получить явные выражения для соответствующего теплового среднего фактора. В приближении тяжелого скалярона соответствующий множитель для бозонов имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{SS \rightarrow ss} v \rangle &= \left[\int_0^\infty dp 4\pi p^2 \exp \left[-\frac{p^2}{2MT} \right] \right]^{-1} \times \\ &\times \left[\int_0^\infty dp \left(\frac{1}{16} \sigma_0 \right) 4\pi p^2 \exp \left[-\frac{p^2}{2MT} \right] \right] = \frac{1}{16} \sigma_0. \end{aligned} \quad (25)$$

В приближении легкого скалярона соответствующий множитель для скаляров (и векторных бозонов заданной киральности) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{SS \rightarrow ss} v \rangle &= \left[\int_0^\infty dp \frac{4\pi p^2}{\exp \left[\frac{p}{T} \right] + 1} \right]^{-1} \times \\ &\times \left[\int_0^\infty dp \left(\frac{1}{30} \sigma_0 \left(\frac{p}{M} \right)^3 \right) \frac{4\pi p^2}{\exp \left[\frac{p}{T} \right] + 1} \right] = \\ &= \frac{31\pi^6}{11340\zeta(3)} \sigma_0 \left(\frac{T}{M} \right)^3. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь ζ обозначает дзета-функцию Римана. Для фермионов данный фактор задан следующим выражением:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{SS \rightarrow \tilde{f}\tilde{f}} v \rangle &= \left[\int_0^\infty dp \frac{4\pi p^2}{\exp \left[\frac{p}{T} \right] + 1} \right]^{-1} \times \\ &\times \left[\int_0^\infty dp \left(\frac{1}{2} \sigma_0 \left(\frac{p}{M} \right) \right) \frac{4\pi p^2}{\exp \left[\frac{p}{T} \right] + 1} \right] = \\ &= \frac{7\pi^4}{360\zeta(3)} \sigma_0 \frac{T}{M}. \end{aligned} \quad (27)$$

Эти результаты показывают, что производство фермионов может стать преобладающим, поскольку оно испытывает более слабое подавление тепловым фактором (T/M) .

Результаты, представленные в этом разделе, следует суммировать таким образом. Обсуждаемые процессы и их вклад в разогрев чрезвычайно чувствительны к иерархии масс. В пределе тяжелого скалярона преобладает рождение скалярных бозонов. В пределе легкого скалярона ситуация намного сложнее. Векторные бозоны заданной киральности и скалярные бозоны производятся в равных количествах. Рождаются также и фермионы, чье рождение, по-видимому, может стать доминирующим, так

как оно гораздо слабее подавлено тепловым фактором. Более подробное обсуждение сценария разогрева с учетом представленных процессов выходит за рамки данной статьи и требует отдельного рассмотрения.

4. РАСПАД СКАЛЯРОНА

Перейдем к обсуждению распадов скалярона, реализующихся только на однопетлевом уровне. Существование таких распадов связано с самодействием скаляронов. Хорошо известно, что квадратичная гравитация

$$\mathcal{A}_{\text{quadratic}} = \int d^4x \sqrt{-g} \left(-\frac{M_{\text{Pl}}^2}{16\pi} \right) \left[R - \frac{1}{6M^2} R^2 \right] \quad (28)$$

однозначно связана со скалярно-тензорной гравитацией [1, 2]:

$$\mathcal{A} = \int d^4x \sqrt{-g} \left[-\frac{M_{\text{Pl}}^2}{16\pi} R + \frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 - \frac{3M_{\text{Pl}}^2 M^2}{32\pi} \left(\exp \left[\sqrt{\frac{16\pi}{3}} \frac{\phi}{M_{\text{Pl}}} \right] - 1 \right)^2 \right]. \quad (29)$$

В этом разделе удобнее использовать планковскую массу M_{Pl} , которая связана с гравитационной константой κ и постоянной Ньютона G_N следующим образом:

$$\kappa^2 = 32\pi G_N = \frac{32\pi}{M_{\text{Pl}}}. \quad (30)$$

Отметим, что в этих формулах мы опустили тензор энергии-импульса материи, который получает минимальную связь с ϕ из-за конформных преобразований. Эта связь не имеет отношения к данной проблеме, поэтому мы не будем обсуждать ее дальше.

Уместно следующее замечание по поводу этого изменения параметризации. Квантовое поведение скалярона можно описать с помощью стандартного подхода пертурбативной квантовой теории поля. Для пертурбативной трактовки требуется отделить кинетическую часть действия от пертурбативной части, описывающей слабое взаимодействие. Из-за этого исходное действие (28) нельзя использовать в рамках обсуждаемого подхода. Его альтернативная параметризация (29), напротив, пригодна для использования в рамках пертурбативного подхода. Эта параметризация явно отделяет кинетическую часть, описывающую распространение свобод-

ных скалярных и тензорных состояний, от пертурбативной части, описывающей взаимодействие этих состояний.

Хотя параметризация (29) позволяет использовать пертурбативный подход, в то же время она ограничивает область применимости модели. Пертурбативный подход можно последовательно использовать только в области слабого поля, где взаимодействие степеней свободы слабо. В исходной параметризации (28) это соответствует области малой кривизны. Система естественным образом входит в эту область возмущений в конце инфляции, когда происходит разогрев. С точки зрения параметризации (28) система приближается к области малой кривизны и может рассматриваться пертурбативно. С точки зрения параметризации (29) скалярное поле приближается к основному состоянию, поэтому его возмущения можно последовательно рассматривать в рамках теории возмущений. С практической точки зрения это означает следующее. Хотя процессы, подобные описанным в этом разделе, могут происходить во время инфляционной фазы, нет оснований полагать, что они могут быть непротиворечиво описаны используемым формализмом.

Поскольку параметризация (29) диагонализует лагранжиан скалярной степени свободы и делает явной структуру его самодействия, имеем:

$$\mathcal{A} = \int d^4x \sqrt{-g} \left[-\frac{M_{\text{Pl}}^2}{16\pi} R + \frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 - \frac{M^2}{2} \phi^2 - \frac{1}{3!} \frac{\sqrt{48\pi}}{M_{\text{Pl}}} M^2 \phi^3 + \mathcal{O} \left(\frac{\phi^4}{M_{\text{Pl}}^4} \right) \right]. \quad (31)$$

Эта формула показывает, что скалярон является скалярной частицей с массой M и имеет бесконечное число членов взаимодействия. Каждый последующий член взаимодействия подавляется более высокой степенью M_{Pl} , что делает релевантным только кубическое взаимодействие в пределе низких энергий:

$$\begin{array}{c} \cdot \cdot \cdot \cdot \\ \cdot \\ \vdots \end{array} = -i\sqrt{48\pi} \frac{M}{M_{\text{Pl}}} M. \quad (32)$$

Существование такой вершины приводит к существованию следующих процессов:

$$\begin{array}{c} q_1 \quad q_2 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \\ \vdots \\ p \end{array} \quad (33)$$

Здесь двойная сплошная линия соответствует произвольной материальной степени свободы. Как и в предыдущем случае, мы будем рассматривать только распады в легкие скаляры, легкие дираковские фермионы и безмассовые вектор по точно таким же причинам. А именно, такие процессы можно легко связать как со стандартной моделью, так и за пределами стандартных модельных степеней свободы.

Кинематика распада скалярона достаточно проста. В системе центра масс она определяется следующими соотношениями импульсов:

$$\begin{cases} p^\mu = \begin{pmatrix} M & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ q_1^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2 + q^2} & 0 & 0 & q \end{pmatrix}, \\ q_2^\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2 + q^2} & 0 & 0 & -q \end{pmatrix}. \end{cases} \quad q = \sqrt{\frac{M^2}{4} - m^2}. \quad (34)$$

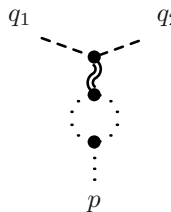
Здесь p обозначает входящий скалярный импульс на оболочке, q_1 и q_2 обозначают исходящие импульсы рожденных степеней свободы с массой m , фиксированные на массовой оболочке.

Ширина распада Γ связана с заданным матричным элементом $\mathcal{M}$ формулой

$$\begin{aligned} d\Gamma &= |\mathcal{M}|^2 (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p - q_1 - q_2) \times \\ &\times \frac{1}{2M} \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3 2E(q_1)} \frac{d^3 q_2}{(2\pi)^3 2E(q_2)} = \\ &= \frac{1}{64\pi^2} \frac{1}{M} \sqrt{1 - 4\left(\frac{m}{M}\right)^2} |\mathcal{M}|^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (35)$$

Вывод этой формулы аналогичен выводу формулы дифференциального сечения и обсуждается в классических учебниках [35–37].

Распад скалярона на два легких скаляра задается следующим матричным элементом:



$$= \mathcal{M}_{S \rightarrow ss}. \quad (36)$$

Здесь и далее p обозначает входящий импульс скалярона на оболочке; q_1 и q_2 обозначают исходящие импульсы скалярного поля с массой m , фиксированные на оболочке; импульсы связаны законом сохранения $p = q_1 + q_2$. Амплитуда может быть выра-

жена с помощью интегралов Пассарино–Вельтмана [28, 40]:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow ss} &= 8\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \frac{(d-3)(d-2)}{d-1} \times \\ &\times \left(D - 2 + 4\frac{m^2}{M^2} \right) i\pi^2 A_0(M^2) - \\ &- 4\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}} \frac{M^3}{M_{\text{Pl}}^3} M \frac{(d-3)(d+2)}{d-1} \times \\ &\times \left(D - 2 + 4\frac{m^2}{M^2} \right) i\pi^2 B_0(M^2, M^2, M^2). \end{aligned} \quad (37)$$

Структура этих интегралов хорошо известна и может быть вычислена с помощью пакетов “Package-X” [30, 31] и “FeynHelpers” [32] для “FeynCalc”:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow ss} &= -i \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} (M^2 + 2m^2) \times \\ &\times \left[\frac{1}{\varepsilon_{\text{UV}}} - \ln \frac{M^2}{\mu^2} + \frac{8}{3} - \gamma - \sqrt{3}\pi - \ln \pi \right] - \\ &- im \frac{32\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \frac{m}{M_{\text{Pl}}}. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь ε_{UV} обозначает параметр размерной регуляризации, а μ обозначает нормировочный масштаб.

Амплитуда состоит из двух членов. Первый член содержит ультрафиолетовую расходимость и подлечит перенормировке. Второй член свободен от ультрафиолетовой расходимости, поэтому он не требует перенормировки. Он обеспечивает конечный вклад в ширину распада, который не зависит от ультрафиолетовой структуры теории. Мы будем использовать следующую перенормированную амплитуду:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow ss} &\rightarrow \mathcal{M}_{S \rightarrow ss, \text{ren}} = \\ &= -i \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} (M^2 + 2m^2) \mathcal{F}_1 - \\ &- im \frac{32\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \frac{m}{M_{\text{Pl}}}. \end{aligned} \quad (39)$$

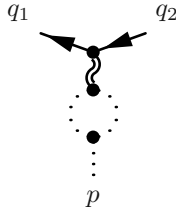
Здесь $\mathcal{F}_1$ обозначает конечную неизвестную константу, которая должна быть установлена по эмпирическим данным. Соответствующая ширина распада дается следующим выражением:

$$\begin{aligned} \Gamma_{S \rightarrow ss} &= \frac{16}{3}\pi^6 \left(\frac{M}{M_{\text{Pl}}} \right)^6 M \sqrt{1 - 4\left(\frac{m}{M}\right)^2} \times \\ &\times \left[\mathcal{F}_1 + 2(1 + \mathcal{F}_1) \left(\frac{m}{M} \right)^2 \right]^2. \end{aligned} \quad (40)$$

Ее ультрафиолетово-конечная часть равна

$$\Gamma_{S \rightarrow ss} \Big|_{\text{UV finite}} = \frac{64}{3} \pi^6 \left(\frac{M}{M_{\text{Pl}}} \right)^6 M \sqrt{1 - 4 \left(\frac{m}{M} \right)^2} \left(\frac{m}{M} \right)^4. \quad (41)$$

Распад скаляра в два легких дираковских фермиона описывается следующей амплитудой:



$$= \mathcal{M}_{S \rightarrow \bar{f}f}. \quad (42)$$

Здесь используются те же обозначения для импульсов. В терминах интегралов Пассарино–Вельтмана амплитуда задается выражением

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow \bar{f}f} = & u(q_1) \times \\ & \times \left[8\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} (d-2) \frac{1}{M^2} \left[(d-3)(\hat{q}_1 + \hat{q}_2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 2(d-2)m_f \right] i\pi^2 A_0(M^2) - \right. \\ & \left. - 4\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} (d+2) \left[(d-3)(\hat{q}_1 + \hat{q}_2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 2(d-2)m_f \right] i\pi^2 B_0(M^2, M^2, M^2) \right] v(q_2). \quad (43) \end{aligned}$$

Здесь u и v обозначают спиноры, описывающие поляризацию внешних фермионов. Соответствующее аналитическое выражение для амплитуды имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow \bar{f}f} = & u(q_1) \times \\ & \times \left[-i8\sqrt{3}\pi^{\frac{7}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} [\hat{q}_1 + \hat{q}_2 + 4m_f] \times \right. \\ & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\text{UV}}} - \ln \frac{M^2}{\mu^2} - \sqrt{3}\pi - \gamma + 3 - \ln \pi \right) \\ & \left. - i32\sqrt{3}\pi^{\frac{7}{2}} \frac{m_f}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \right] v(q_2). \quad (44) \end{aligned}$$

В полной аналогии с предыдущим случаем, амплитуда содержит ультрафиолетово-конечную часть, на которую не влияет перенормировка. Мы используем следующее перенормированное выражение для амплитуды:

$$\mathcal{M}_{S \rightarrow \bar{f}f} \rightarrow \mathcal{M}_{S \rightarrow \bar{f}f, \text{ren}} =$$

$$\begin{aligned} = & u(q_1) \left[-i8\sqrt{3}\pi^{\frac{7}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} [\hat{q}_1 + \hat{q}_2 + 4m_f] \mathcal{F}_2 - \right. \\ & \left. - i32\sqrt{3}\pi^{\frac{7}{2}} \frac{m_f}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \right] v(q_2). \quad (45) \end{aligned}$$

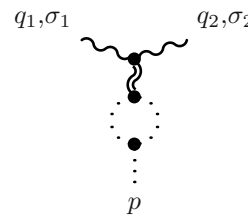
Оно дает следующее выражение для ширины распада (выполняется суммирование по всем внешним фермионным поляризациям):

$$\begin{aligned} \Gamma_{S \rightarrow \bar{f}f} = & 384\pi^6 \left(\frac{M}{M_{\text{Pl}}} \right)^6 M \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \times \\ & \times \left[1 - 4 \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}} (1 + \mathcal{F}_2)^2. \quad (46) \end{aligned}$$

Часть этой ширины распада, которая не зависит от ультрафиолетовой структуры теории, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \Gamma_{S \rightarrow \bar{f}f} \Big|_{\text{UV finite}} = & 384\pi^6 \left(\frac{M}{M_{\text{Pl}}} \right)^6 M \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \left[1 - 4 \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}}. \quad (47) \end{aligned}$$

Наконец, распад скалярона на пару безмассовых векторов задается следующим матричным элементом:



$$= \mathcal{M}_{S \rightarrow \nu\bar{\nu}}. \quad (48)$$

В терминах интегралов Пассарино–Вельтмана амплитуда определяется выражением

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{S \rightarrow \nu\bar{\nu}} = & \varepsilon_{\sigma_1}^*(q_1) \varepsilon_{\sigma_2}^*(q_2) 8\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} \times \\ & \times [(d-3)(d-4)M^2 \eta^{\sigma_1 \sigma_2} - 2(d-3)(d-4)q_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} - 4q_1^{\sigma_1} q_2^{\sigma_2}] \times \\ & \times \left[-\frac{d-2}{d-1} \frac{1}{M^2} i\pi^2 A_0(M^2) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{d+2}{d-1} i\pi^2 B_0(M^2, M^2, M^2) \right]. \quad (49) \end{aligned}$$

Соответствующее аналитическое выражение имеет вид

$$\mathcal{M}_{S \rightarrow \nu\bar{\nu}} = \varepsilon_{\sigma_1}^*(q_1) \varepsilon_{\sigma_2}^*(q_2) \left[-i \frac{32\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{1}{M_{\text{Pl}}} \frac{M^2}{M_{\text{Pl}}^2} q_1^{\sigma_1} q_2^{\sigma_2} \times \right.$$

$$\times \left[\frac{1}{\varepsilon_{UV}} - \ln \frac{M^2}{\mu^2} + \frac{17}{3} - \gamma - \sqrt{3}\pi - \ln \pi \right] - \\ - i \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{M^3}{M_{Pl}^3} M \eta^{\sigma_1 \sigma_2} + i \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{1}{M_{Pl}} \frac{M^2}{M_{Pl}^2} q_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} \Big]. \quad (50)$$

Мы используем регуляризованную амплитуду

$$\mathcal{M}_{S \rightarrow v\bar{v}} \rightarrow \mathcal{M}_{S \rightarrow v\bar{v}, \text{ren}} = \varepsilon_{\sigma_1}^*(q_1) \varepsilon_{\sigma_2}^*(q_2) \times \\ \times \left[-i \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{1}{M_{Pl}} \frac{M^2}{M_{Pl}^2} q_1^{\sigma_1} q_2^{\sigma_2} \mathcal{F}_3 \right. \\ \left. - i \frac{32\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{1}{M_{Pl}} \frac{M^3}{M_{Pl}^3} M \eta^{\sigma_1 \sigma_2} + i \frac{16\pi^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{1}{M_{Pl}} \frac{M^2}{M_{Pl}^2} q_1^{\sigma_2} q_2^{\sigma_1} \right]. \quad (51)$$

Он дает следующую ширину распада:

$$\Gamma_{S \rightarrow v\bar{v}} = \frac{32}{3} \pi^6 \left(\frac{M}{M_{Pl}} \right)^6 M. \quad (52)$$

В отличие от предыдущих случаев, данная ширина распада не зависит от константы перенормировки $\mathcal{F}_3$. Причиной этого является импульсная структура амплитуды. Операторы поляризации векторов ε являются поперечными:

$$\varepsilon_\sigma(q) q^\mu = 0. \quad (53)$$

Следовательно, часть амплитуды, зависящая от перенормировки, исчезает. Следует отметить, что это свойство выполняется только на массовой оболочке.

Обратимся к обсуждению следствий вычисленных ширины распада (40), (46) и (52). Важно отметить, что эти ширины распада подавлены общим планковским фактор M/M_{Pl} . Его присутствие обеспечивает чрезвычайно сильное подавление. Удобнее оперировать ширинами распада, нормированными на этот фактор:

$$\bar{\Gamma}_{S \rightarrow ss} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Gamma_{SS \rightarrow ss}}{(M/M_{Pl})^6} = \\ = M \frac{16}{3} \pi^6 \sqrt{1 - 4 \left(\frac{m}{M} \right)^2} \left[\mathcal{F}_1 + 2(1 + \mathcal{F}_1) \left(\frac{m}{M} \right)^2 \right]^2, \\ \bar{\Gamma}_{S \rightarrow f\bar{f}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Gamma_{S \rightarrow f\bar{f}}}{(M/M_{Pl})^6} = \\ = 384 \pi^6 M \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \left[1 - 4 \left(\frac{m_f}{M} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}} (1 + \mathcal{F}_2)^2, \\ \bar{\Gamma}_{S \rightarrow v\bar{v}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Gamma_{S \rightarrow v\bar{v}}}{(M/M_{Pl})^6} = \frac{32}{3} \pi^6 M. \quad (54)$$

Их структура позволяет сделать следующие выводы.

Прежде всего, распад в безмассовые векторы свободен от внешних параметров и соответствующее характерное время жизни можно вычислить явно:

$$\tau_{S \rightarrow v\bar{v}} = \left(\frac{M_{Pl}}{M} \right)^7 \frac{3}{32\pi^6} \frac{1}{M_{Pl}} \simeq \\ \simeq 9.7515 \cdot 10^{-5} \left(\frac{M_{Pl}}{M} \right)^7 T_{Pl}. \quad (55)$$

Здесь $T_{Pl} = \hbar/(M_{Pl}c^2) \simeq 5.391 \cdot 10^{-44}$ с — планковское время. Чем меньше масса скалярона, тем больше ожидаемое время жизни. Для $M \sim 10^{-7} M_{Pl}$ характерное время жизни составляет около секунды. Для M , равного массе топ кварка, характерное время жизни равно $\tau_{S \rightarrow v\bar{v}} \sim 10^{64}$ с, что на 47 порядок больше возраста Вселенной. Наконец, время жизни равно возрасту Вселенной для $M/M_{Pl} \sim 10^{-10}$, что отмечает область масс скалярона, для которых актуален обсуждаемый механизм распада:

$$10^{-10} \ll \frac{M}{M_{Pl}} < 1. \quad (56)$$

Во-вторых, как для скалярного, так и для фермионного сбора полученных данных не достаточно для однозначных выводов. В пределе $|\mathcal{F}_{1,2}| \rightarrow \infty$ соответствующие ширины распада можно сделать относительно большими. Более того, для каждого канала можно найти такие значения $\mathcal{F}_{1c}$, $\mathcal{F}_{2c}$, для которых соответствующие ширины распада обращаются в нуль:

$$\mathcal{F}_{1c} = -\frac{2 \left(\frac{m}{M} \right)^2}{1 + 2 \left(\frac{m}{M} \right)^2}, \quad \mathcal{F}_{2c} = -1. \quad (57)$$

Тем не менее, сделать некоторые содержательные выводы все же можно. А именно, можно максимизировать ширину распада для отношения масс.

Канал распада фермионов предоставляет наиболее простой случай. Ширина распада максимальна, когда отношение масс принимает следующее значение:

$$\frac{m_f}{M} = \frac{1}{\sqrt{10}}. \quad (58)$$

Это значение не зависит от константы перенормировки $\mathcal{F}_2$. Мы берем $\mathcal{F}_2 = 0$, потому что это позволяет нам оперировать с ультрафиолетово-независимой частью амплитуды. Соответствующая максимальная ширина распада и минимальное характеристическое время жизни:

$$\bar{\Gamma}_{S \rightarrow f\bar{f}, \text{max}} = \frac{576}{25} \sqrt{\frac{3}{5}} \pi^6 M,$$

$$\tau_{S \rightarrow \tilde{f}\tilde{f}, \max} = \left(\frac{M_{\text{Pl}}}{M}\right)^7 \frac{25}{576\pi^6} \sqrt{\frac{5}{3}} T_{\text{Pl}} \simeq 5.8283 \cdot 10^{-5} \left(\frac{M_{\text{Pl}}}{M}\right)^7 T_{\text{Pl}}. \quad (59)$$

По полной аналогии с предыдущим случаем, он равен возрасту Вселенной при $M/M_{\text{Pl}} \sim 10^{-10}$.

Скалярный канал распада представляет собой более сложный случай, поскольку максимальное значение сечения определяется нормировочной константой $\mathcal{F}_1$:

$$\frac{1}{M} \bar{\Gamma}_{S \rightarrow ss, \max} = \begin{cases} \frac{64}{75} \pi^6 (1 + 3\mathcal{F}_1)^2 \sqrt{\frac{1+3\mathcal{F}_1}{5+5\mathcal{F}_1}}, & \mathcal{F}_1 < -2 \text{ or } \mathcal{F}_1 > \xi \\ \frac{16}{3} \pi^6 \mathcal{F}_1^2, & -2 < \mathcal{F}_1 < \xi. \end{cases} \quad (60)$$

Здесь $\mathcal{F}_1 = -2$ и $\mathcal{F}_1 = \xi \simeq -0.14032$ являются корнями уравнения

$$\frac{4}{25} (1 + 3\mathcal{F}_1)^2 \sqrt{\frac{1+3\mathcal{F}_1}{5+5\mathcal{F}_1}} = \mathcal{F}_1^2. \quad (61)$$

Выражение максимального сечения неограниченно сверху и достигает минимума в точке $\mathcal{F}_1 = \xi$. Соответствующее характерное время жизни составляет

$$\tau_{S \rightarrow ss, \max} = \left(\frac{M_{\text{Pl}}}{M}\right)^7 \frac{3}{16\pi^6} \frac{1}{\xi^2} T_{\text{Pl}} = 9.9052 \cdot 10^{-3} \left(\frac{M_{\text{Pl}}}{M}\right)^7 T_{\text{Pl}}. \quad (62)$$

Время жизни равно возрасту Вселенной, если $M/M_{\text{Pl}} \sim 10^{-9}$, что аналогично предыдущим случаям.

Результаты этого раздела следует резюмированы следующим образом. Прежде всего, ширины распада (40) и (46) сильно зависят от значения констант перенормировки $\mathcal{F}_1$ и $\mathcal{F}_2$. Несмотря на это, можно максимизировать соответствующие ширины распадов для массового фактора M/M_{Pl} . Это позволяет установить осмысленные нижние границы характерных времен жизни (62), (60), (55). Эти результаты показывают, что представленный механизм распада актуален только для следующего диапазона иерархии масс:

$$10^{-9} \ll \frac{M}{M_{\text{Pl}}} < 1. \quad (63)$$

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В данной статье мы обсудили новые каналы постинфляционного разогрева в модели гравитации $R + R^2$. Модель имеет дополнительную скалярную степень свободы, называемую скалярон. Он ведет инфляционную фазу расширения в режиме медленного скатывания по плоской части потенциала. Когда инфляция завершается, Вселенная наполняется скалярными частицами, которые должны вновь разогреть Вселенную, передав свою энергию в сектор материи и темной материи.

Обсуждаются новые каналы такого разогрева, возникающие из-за квантовых гравитационных эффектов. Пертурбативная квантовая гравитация служит формализмом, способным описать такие эффекты контролируемым образом. Первый канал, обсуждаемый в данной статье, — это аннигиляция двух скаляронов в пару состояний материи. Мы получили сечения аннигиляции для массивных скаляронов (11), массивных дираковских фермионов (15) и безмассовых векторов (20). Второй обсуждаемый канал — это распад одиночного скалярона в пару двух состояний материи, реализующийся на однопетлевом уровне. Такие процессы возможны благодаря тому, что скалярон имеет неминимальное кубическое самодействие. Это позволяет скалярону возбуждать промежуточные гравитонные состояния и распадаться в состояния чистой материи. Мы рассчитали ширину распада для массивных скаляронов (40), массивных дираковских спиноров (46) и безмассовых векторов (52).

Подробное обсуждение сценария повторного нагрева, учитывающего эти новые каналы распада, требует отдельного рассмотрения и выходит далеко за рамки данной статьи. Однако можно сделать некоторые содержательные выводы о влиянии представленных процессов.

Во-первых, в пределе тяжелого скалярона рождение фермионов и безмассовых векторов сильно подавлено, поэтому эффективно рождаются только скалярные частицы. В то же время в пределе тяжелого скалярона нельзя пренебрегать обсуждаемыми ширинами распада. На основании рассуждений, приведенных в предыдущем разделе, можно сделать вывод, что при массе скалярона $M \gg 10^{-9} M_{\text{Pl}}$ характерное время жизни скалярона меньше возраста Вселенной. Таким образом, предел тяжелых скаляронов содержит широкую и интересную феноменологию, поскольку он может способствовать повторному нагреву как по каналам аннигиляции, так и по каналам распада.

Во-вторых, в пределе легкого скалярона обсуждаемые распады сильно подавлены множителем $(M_{\text{Pl}}/M)^7$, что делает их пренебрежимо малыми. Канал аннигиляции, напротив, обеспечивает более сложную феноменологию. Рождаются все типы частиц. Бозонные состояния (т. е. скалярные состояния и векторные состояния с фиксированной киральностью) рождаются в равных количествах. Соответствующие сечения растут квадратично с увеличением импульса в системе центра масс. Рождение фермионов приближается к некоторому конечному предельному значению и не растет дальше. Однако эти сечения не оказывают прямого влияния на макроскопическую скорость рождения частиц. Эволюция скалярной плотности во времени определяется уравнением Зельдовича–Ли–Вайнберга, которое содержит сечение аннигиляции после определенного термодинамического усреднения. Мы вычислили соответствующие факторы и установили, что рождение фермионов подавлено тепловым фактором (T/M) , а рождение бозонов испытывает более сильное термическое подавление $(T/M)^3$. Следовательно, разумно предположить, что рождение бозонов доминирует только на ранней стадии разогрева, а рождение фермионов преобладает на более поздних стадиях.

Результаты настоящей работы позволяют исследовать сценарий постинфляционного разогрева в модели гравитации $R + R^2$, объясняющей обсуждаемые процессы. Такие исследования представляют собой самостоятельную сложную проблему, которая требует отдельного рассмотрения.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-00294, <https://rscf.ru/project/22-22-00294/>).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Accioly, S. Ragusa, H. Mukaim, and E. C. de Rey Neto, *Int. J. Theor. Phys.* **39**, 1599 (2000); doi:10.1023/A:1003632311419
2. A. Hindawi, B. A. Ovrut, and D. Waldram, *Phys. Rev. D* **53**, 5583 (1996); doi:10.1103/PhysRevD.53.5583 [arXiv:hep-th/9509142 [hep-th]].
3. R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **125**, 2163 (1962); doi:10.1103/PhysRev.125.2163.
4. K. i. Maeda, *Phys. Rev. D* **39**, 3159 (1989); doi:10.1103/PhysRevD.39.3159.
5. V. Faraoni, E. Gunzig, and P. Nardone, *Fund. Cosmic Phys.* **20**, 121 (1999) [arXiv:gr-qc/9811047 [gr-qc]].
6. A. De Felice and S. Tsujikawa, *Living Rev. Rel.* **13**, 3 (2010) doi:10.12942/lrr-2010-3 [arXiv:1002.4928 [gr-qc]].
7. A. A. Starobinsky, *Phys. Lett. B* **91**, 99 (1980); doi:10.1016/0370-2693(80)90670-X.
8. Y. Akrami *et al.* [Planck], *Astron. Astrophys.* **641**, A10 (2020); doi:10.1051/0004-6361/201833887 [arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO]].
9. P. A. R. Ade *et al.* [BICEP and Keck], *Phys. Rev. Lett.* **127**, no.15, 151301 (2021); doi:10.1103/PhysRevLett.127.151301 [arXiv:2110.00483 [astro-ph.CO]].
10. D. Paoletti, F. Finelli, J. Valiviita, and M. Hazumi, [arXiv:2208.10482 [astro-ph.CO]].
11. G. Galloni, N. Bartolo, S. Matarrese, M. Migliaccio, A. Ricciardone, and N. Vittorio, [arXiv:2208.00188 [astro-ph.CO]].
12. A. Vilenkin, *Phys. Rev. D* **32**, 2511 (1985); doi:10.1103/PhysRevD.32.2511.
13. A. S. Koshelev, L. Modesto, L. Rachwal, and A. A. Starobinsky, *JHEP* **11**, 067 (2016); doi:10.1007/JHEP11(2016)067 [arXiv:1604.03127 [hep-th]].
14. E. V. Arbuzova, A. D. Dolgov, and L. Reverberi, *JCAP* **02**, 049 (2012); doi:10.1088/1475-7516/2012/02/049 [arXiv:1112.4995 [gr-qc]].
15. E. V. Arbuzova, A. D. Dolgov, and R. S. Singh, *JCAP* **07**, 019 (2018); doi:10.1088/1475-7516/2018/07/019 [arXiv:1803.01722 [gr-qc]].
16. E. Arbuzova, A. Dolgov, and R. Singh, *Symmetry* **13**, 877 (2021); doi:10.3390/sym13050877.
17. B. N. Latosh, *Phys. Part. Nucl.* **51**, 859 (2020); doi:10.1134/S1063779620050056 [arXiv:2003.02462 [hep-th]].
18. C. P. Burgess, *Living Rev. Rel.* **7**, 5 (2004); doi:10.12942/lrr-2004-5 [arXiv:gr-qc/0311082 [gr-qc]].
19. M. Levi, *Rept. Prog. Phys.* **83**, 075901 (2020); doi:10.1088/1361-6633/ab12bc [arXiv:1807.01699 [hep-th]].
20. X. Calmet, *Int. J. Mod. Phys. D* **22**, 1342014 (2013); doi:10.1142/S0218271813420145 [arXiv:1308.6155 [gr-qc]].
21. P. Vanhove, [arXiv:2104.10148 [gr-qc]].

22. G. 't Hooft and M. J. G. Veltman, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Theor. A **20**, 69 (1974).
23. M. H. Goroff and A. Sagnotti, Phys. Lett. B **160**, 81 (1985); doi:10.1016/0370-2693(85)91470-4.
24. D. Prinz, Class. Quant. Grav. **38**, 215003 (2021); doi:10.1088/1361-6382/ac1cc9 [arXiv:2004.09543 [hep-th]].
25. B. S. DeWitt, Phys. Rev. **162**, 1239 (1967); doi:10.1103/PhysRev.162.1239.
26. S. Sannan, Phys. Rev. D **34**, 1749 (1986); doi:10.1103/PhysRevD.34.1749.
27. B. Latosh, Class. Quant. Grav. **39**, 165006 (2022); doi:10.1088/1361-6382/ac7e15 [arXiv:2201.06812 [hep-th]].
28. R. Mertig, M. Bohm, and A. Denner, Comput. Phys. Commun. **64**, 345 (1991); doi:10.1016/0010-4655(91)90130-D.
29. V. Shtabovenko, R. Mertig, and F. Orellana, Comput. Phys. Commun. **256**, 107478 (2020); doi:10.1016/j.cpc.2020.107478 [arXiv:2001.04407 [hep-ph]].
30. H. H. Patel, Comput. Phys. Commun. **197**, 276 (2015); doi:10.1016/j.cpc.2015.08.017 [arXiv:1503.01469 [hep-ph]].
31. H. H. Patel, Comput. Phys. Commun. **218**, 66 (2017); doi:10.1016/j.cpc.2017.04.015 [arXiv:1612.00009 [hep-ph]].
32. V. Shtabovenko, Comput. Phys. Commun. **218**, 48 (2017) doi:10.1016/j.cpc.2017.04.014; [arXiv:1611.06793 [physics.comp-ph]].
33. S. Mandelstam, Phys. Rev. **115**, 1741 (1959); doi:10.1103/PhysRev.115.1741.
34. S. Mandelstam, Phys. Rev. **112**, 1344 (1958); doi:10.1103/PhysRev.112.1344.
35. S. M. Bilenky, *Introduction to Feynman Diagrams and Electroweak Interactions Physics*, Moscow, Nauka (1995).
36. S. Weinberg, *The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations*, Cambridge University Press (2005).
37. M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to quantum field theory*, Addison-Wesley (1995).
38. Y. b. Zeldovich, Adv. Astron. Astrophys. **3**, 241 (1965); doi:10.1016/b978-1-4831-9921-4.50011-9.
39. B. W. Lee and S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. **39**, 165 (1977); doi:10.1103/PhysRevLett.39.165.
40. G. Passarino and M. J. G. Veltman, Nucl. Phys. B **160**, 151 (1979); doi:10.1016/0550-3213(79)90234-7.

КАЛИБРОВКА СЧИТЫВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОНИКИ ДЕТЕКТОРА "ТРОИЦК НЮ-МАСС" С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЦИФРОВЫХ ФИЛЬТРОВ СИГНАЛОВ

*С. Б. Абдиганиева^{a,b}, А. И. Берлев^a, М. А. Бочков^{a,b}, Н. А. Лиховид^a,
В. С. Пантуев^{a,b*}, С. В. Задорожний^a*

*^a Институт ядерных исследований Российской академии наук
117312, Москва, Россия*

*^b Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 9 ноября 2022 г.,
после переработки 9 ноября 2022 г.
Принята к публикации 20 ноября 2022 г.

Описаны результаты настройки и калибровки электроники детектора, работающего в режиме постоянной оцифровки сигнала. Целью эксперимента является поиск признаков стерильного нейтрино в бета-распаде трития. Считывающая электроника работает в режиме непрерывной оцифровки, который требует оптимизации временного окна с целью минимизировать шум и улучшить энергетическое разрешение. Мы используем 7-пиксельный кремниевый дрейфовый детектор (silicon drift detector, SDD) и КМОП зарядочувствительный предусилитель с очень низкой интегрирующей емкостью. Усилитель формирует медленно растущий сигнал и работает в режиме периодического сброса. 125 МГц АЦП оцифровывает сигналы. Используя калибровочные данные с источников гамма-излучения Fe^{55} и Am^{241} , мы применили треугольный и трапециевидный фильтры для получения наилучшего подавления шума и улучшения разрешения. Также был исследован вариант с дифференцированием выходного сигнала.

DOI: 10.31857/S0044451023050036
EDN: BBYKGW

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время многие эксперименты основаны на высокотехнологичных достижениях и решениях с целью улучшения свойств детекторов и сопутствующей электроники. На установке "Троицк ню-масс" мы используем 7-пиксельный кремниевый дрейфовый детектор (silicon drift detector, SDD) [1] с электроникой для прямой оцифровки. Целью эксперимента "Троицк ню-масс" является поиск новой гипотетической частицы — стерильного нейтрино [2]. Если эта частица существует, она могла бы объяснить давнюю проблему Стандартной модели: почему отсутствуют правые нейтрино и могут ли стерильные являться этой частицей? В нашем эксперименте мы проводим прецизионные измере-

ния спектра электронов от бета-распада трития с целью найти искажение формы спектра. Установка "Троицк ню-масс" состоит из газового тритиевого источника и электростатического спектрометра [3] с кремниевым дрейфовым детектором для регистрации электронов. В нашей установке сигналы от детектора непрерывно оцифровываются и требуется выработать триггер, обеспечить быстрое считывание и фильтрацию. В настоящей статье описаны детали системы считывания с детектора. Мы представляем несколько цифровых фильтров, которые помогают уменьшить шум, понизить уровень срабатывания триггера и улучшить разрешение при последующей обработке данных.

2. ДЕТЕКТОР И ЭЛЕКТРОНИКА

Как отмечалось ранее, мы используем кремниевый дрейфовый детектор с семью пикселями по 2 мм каждый для детектирования электронов с энерги-

* E-mail: pantuev@inr.ru

ями ниже 20 кэВ. Главным преимуществом такого детектора является очень низкая емкость анода, менее 100 фФ. Детектор был изготовлен в Полупроводниковой лаборатории общества Макса Планка (HLL) [1]. Каждый анод соединен с зарядочувствительным усилителем, CUBE [4], который работает в режиме импульсного сброса с конденсатором емкостью 20 фФ в петле обратной связи сигнала. CUBE это КМОП предусилитель для радиационных детекторов. Система считывания изготовлена в XGLab — Bruker Nano Analytics [4]. Она представляет собой восьмиканальную управляющую карту, XGL-CBV-8sch. Подобные детекторы уже были протестированы в спектрометре "Троицк нью-масс" в 2017–2019 гг. [5], они показали превосходное энергетическое разрешение, менее 200 эВ (ширина на полувысоте пика). Непрерывная оцифровка сигнала обеспечивается 16-канальным блоком TQDC (время – заряд цифровым преобразователем), выполненным в VME-стандарте и разработанным в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ), г. Дубна, для проекта НИКА [6]. Модуль TQDC позволяет работать как в режиме непрерывной оцифровки, так и с использованием внутреннего ПЛИС. Каждый канал TQDC имеет 12-битный АЦП с частотой оцифровки в 125 МГц. В нашем случае, как отмечалось, мы рассматриваем возможности режима прямой оцифровки и использования внешнего сигнала сброса для аналоговой электроники. Выходной сигнал усилителя непрерывно линейно растет от -0.5 В до $+0.5$ В из-за неизбежного тока утечки детектора и сбрасывается внешним сигналом каждые 100–200 мкс. В случае прохождения частицы заряд интегрируется и создает ступеньку на линейно растущем сигнале, рис. 1.

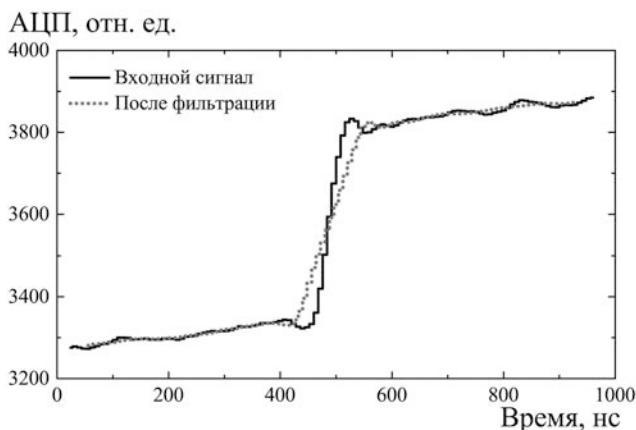


Рис. 1. Линейно растущий выходной сигнал со ступенькой, которая вызвана прошедшей частицей. Пунктирной линией показано скользящее среднее по 16 точкам оцифровки

3. СЧИТЫВАНИЕ И ФИЛЬТРАЦИЯ СИГНАЛА

3.1. Порог триггера

Во время измерений энергетического спектра бета-распада трития одним из важнейших параметров является порог регистрации сигнала. Чем ниже порог, тем более точны данные. Для оптимизации считывающей системы нам необходимо использовать цифровой порог со скользящим средним. Для этой цели мы можем применить, к примеру, простейшее линейное преобразование:

$$a_i = \frac{1}{m} \sum_{i-m/2}^{i+m/2-1} x_i, \quad (1)$$

где a_i — скользящее среднее, x_i — значение АЦП на i -й выборке, m — интервал усреднения.

Мы провели набор калибровочных данных с использованием изотопов Fe^{55} и Am^{241} в режиме прямой оцифровки с временем каналов АЦП по 8 нс. Пунктирная линия на рис. 1 демонстрирует, как работает скользящее среднее. Для каждого события окно подобрано так, чтобы фронт сигнала находился в середине кадра. Далее, мы применяем усреднение по нескольким точкам, m . Заметно, что флуктуации шума уменьшаются; колебания на растущем фронте практически полностью исчезают. Восстановление амплитуды сигнала, как высоты ступеньки, значительно улучшается.

Приведенный выше пример для установки порога может быть использован, только если общее смещение под сигналом является постоянной величиной. Для того чтобы применить цифровой порог для постоянно растущего смещения сигнала, выполним несколько другое преобразование: применим цифровой треугольный фильтр, $a_i = \hat{H} \hat{x}$, где $\hat{H} = (-m, m)$ обозначает коэффициенты фильтра. Для треугольного фильтра они равны -1 и $+1$, повторенные m раз каждый. Этот фильтр суммирует m точек сигнала, далее вычитает из этой суммы другую, полученную по предшествующим m точкам, и нормирует разность на m . При применении фильтра к равномерно растущему сигналу результатом фильтра будет константа. При приближении к «ступеньке» мы получаем растущий, а потом убывающий треугольный сигнал с длинами склонов по m точек. Дополнительно мы обеспечиваем уменьшение шума на некоторую величину. В случае трапецеидального фильтра обозначение выглядит как $\hat{H} = (-m, l, m)$, где l задает некоторое количество нулей между интервалами, от которых берется разность, определяя, таким образом, ширину вершины трапеции.

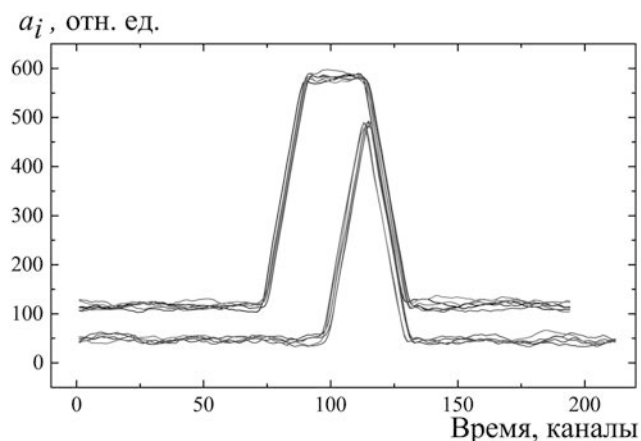


Рис. 2. Результаты применения трапецеидального и треугольного фильтров для нескольких событий при $m=16$ точек и $l=16$ точек для источника Fe^{55}

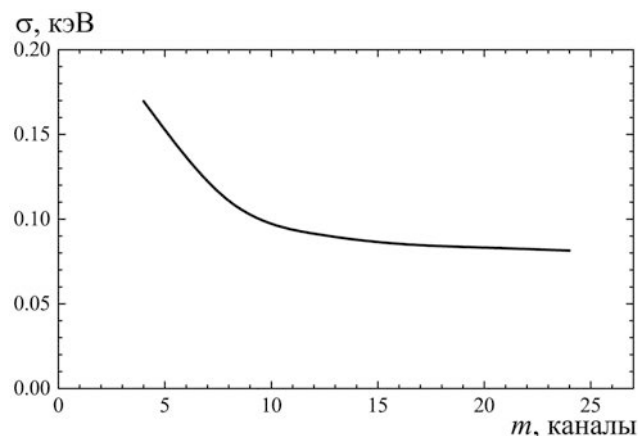


Рис. 3. Ширина пика распределения шума (σ) в зависимости от параметра m для треугольного фильтра

На рис. 2 показан результат действия треугольного и трапецеидального фильтров при $m=16$ точек и $l=16$ точек к реальным данным. Стоит обратить внимание, что для постоянно растущего сигнала появляется нулевой уровень, который отличается для различных m и l .

Чтобы подобрать наилучшее значение цифрового порога, мы измерили зависимость размаха амплитуды шума от параметра фильтра m . В каждом случае распределение шумовых амплитуд фитировалось функцией Гаусса. На рис. 3 показана зависимость уровня шума от параметра треугольного фильтра m . Шум резко уменьшается при $m > 8$ точек и практически насыщается при $m > 16$. Для $m = 16$ мы получаем уровень шума при 3σ равный 0.27 кэВ, что определяет возможный уровень цифрового порога.

Была исследована зависимость величины шума для трапецеидального фильтра при $m = 16$ и для

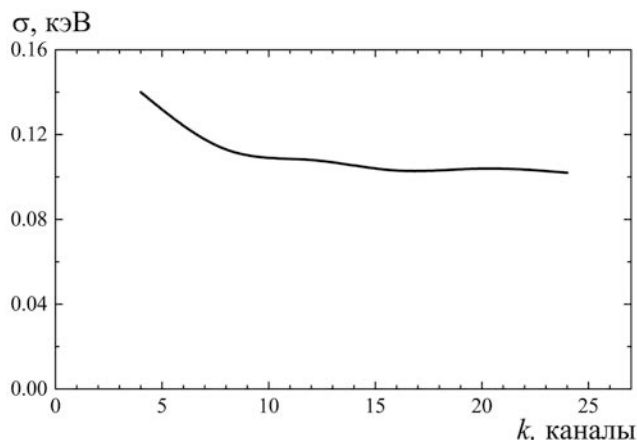


Рис. 4. Уровень шума для дифференцированного сигнала в зависимости от ширины фильтра, k

различных l . Заметного улучшения мы не увидели при увеличении параметра l от 0 до 24 точек. Таким образом, можно сделать вывод, что треугольный фильтр работает удовлетворительно для подавления шума.

Также дополнительно протестирована конфигурация, в которой линейно растущий сигнал дифференцирован разделительным конденсатором емкостью 1 нФ. В этом случае для триггера можно использовать обычное скользящее среднее. На рис. 4 показана зависимость уровня шума от ширины скользящего среднего k . Наилучшее значение приблизительно на 20% хуже, чем в случае использования треугольного фильтра, как на рис. 3.

3.2. Оптимизация энергетического разрешения

Для каждого триггера нам необходимо оптимизировать длину временного окна (ширину выборки) с целью сохранить его по возможности коротким, сохраняя при этом разумное энергетическое разрешение. Были использованы калибровочные данные с источником гамма-излучения Fe^{55} . Источник имеет интенсивную гамма-линию при 5.89 кэВ и слабую при 6.49 кэВ. Ширина кадра была установлена достаточно большой, около двух микросекунд с сигналом в виде ступеньки посередине. Далее применяем треугольный и трапецеидальный фильтры для восстановления амплитуды сигнала.

На рис. 5 показано энергетическое разрешение после использования треугольного фильтра. Снова видно, что энергетическое разрешение выходит на плато при $m > 16$. Энергетический спектр источника Fe^{55} показан на рис. 6 при $m = 16$. Четко видны пики при 5.89 кэВ и меньший при 6.49 кэВ. Стоит отметить, что разрешение детектора по энер-

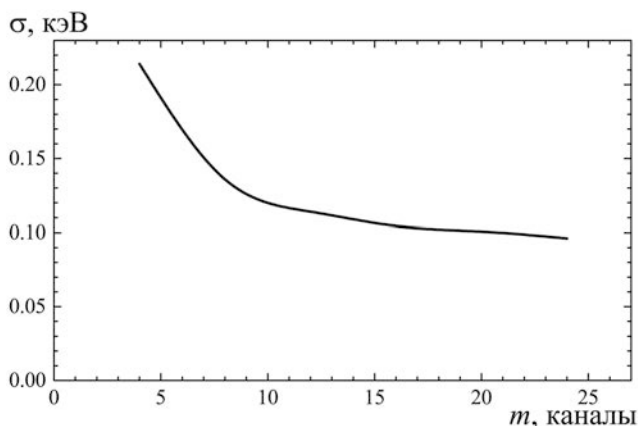


Рис. 5. Энергетическое разрешение (σ) от Fe⁵⁵ пика 5.9 кэВ в зависимости от параметра m треугольного фильтра

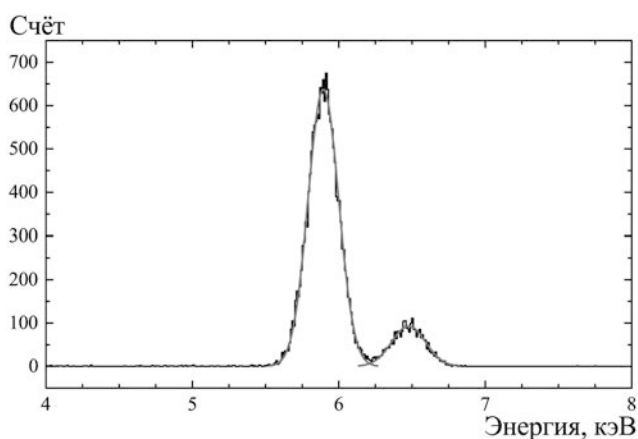


Рис. 6. Гамма-спектр Fe⁵⁵ (черная гистограмма) с применением треугольного фильтра при $m = 16$ и аппроксимация суммой двух функций Гаусса (сплошная красная линия) с $\sigma = 104$ эВ

гии $\sigma = 0.11$ кэВ получается несколько хуже, чем лучшее разрешение SDD-детекторов с полной шириной на половине высоты равной 150 эВ (или σ примерно 0.062 кэВ), которое было представлено в работе [7]. Тем не менее в указанной работе такое разрешение было получено при температуре детектора -20°C , а в наших измерениях температура была $+25^\circ\text{C}$. Кроме этого, из предыдущего опыта [5] мы знаем, что данный детектор имеет большее значение токов утечки по сравнению с детекторами, которые были использованы ранее.

Дополнительно был измерен спектр от источника гамма-излучения Am²⁴¹. На рис. 7 приводится спектр, восстановленный с помощью треугольного фильтра при $m = 16$. Явно видна серия линий между 13–18 кэВ и слабый пик от распада в 59.54 кэВ.

Применяя трапецеидальный фильтр при $m = 16$ и при различных l , в пределах ошибки мы не увидели улучшений по сравнению с треугольным (т.е.

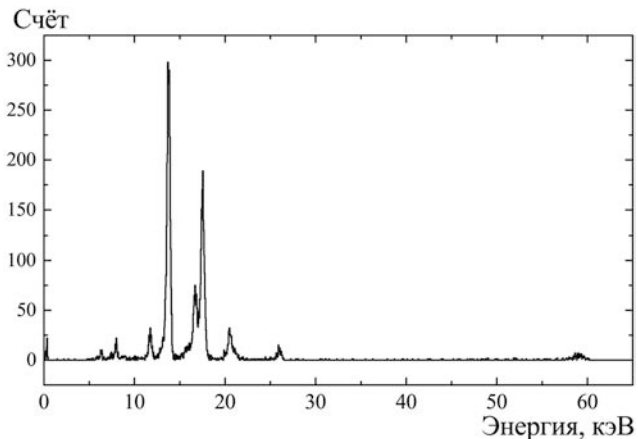


Рис. 7. Гамма-спектр Am²⁴¹, треугольный фильтр с $m = 16$

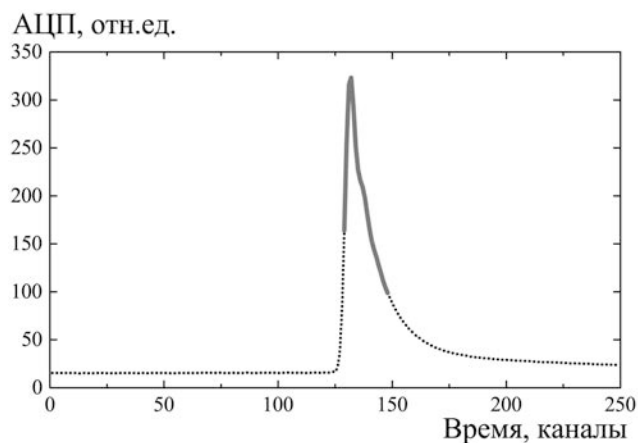


Рис. 8. Форма дифференцированного сигнала (пунктирная линия) и диапазон интегрирования для получения максимального разрешения по энергии (сплошная линия)

$l = 0$) фильтром. Таким образом, мы заключаем, что использование треугольного фильтра с выборками по $m = 16$ удовлетворит требованиям для подбора порога и энергетического разрешения. Минимальное окно для обработки треугольным фильтром получается равным $16 + 16 \cdot 2 = 48$ временных точек АЦП.

3.3. Энергетическое разрешение дифференцированного сигнала

Прохождение частицы через кремниевый детектор индуцирует появление заряда, который формирует сигнал. В данном детекторе накопление заряда происходит примерно за 50 нс, максимум за 80 нс. Это время определяет фронт возрастания ступеньки на линейно растущем сигнале. В некоторых измерениях более удобным является дифференцирование линейно растущего сигнала из платы регистрации, чтобы получить сигнал с фронтом возрастания и

убывания без линейного роста базовой составляющей. Так как время собирания заряда колеблется от события к событию, то любой пассивный фильтр, например, дифференциатор, будет приводить к эффекту «баллистического дефицита» [8], т. е. к потерям амплитуды выходного сигнала из-за соотношения между ограниченным временем собирания заряда в детекторе и характерными временными параметрами электроники. На рис. 8 пунктирной линией представлен оцифрованный сигнал от Fe^{55} . Форма сигнала усреднена по нескольким событиям. Чтобы получить наилучшее разрешение и минимизировать баллистический дефицит, мы применили несколько методов. Если взять только максимум в каждом кадре, то энергетическое разрешение составляет $\sigma = 187.1$ эВ. Другой подход состоит в интегрировании некоторой окрестности от максимума сигнала. Суммирование амплитуд АЦП от -8 до $+30$ временных отсчетов от максимума приводит к улучшению разрешения до $\sigma = 132$ эВ. Изменяя границы диапазона интегрирования, мы нашли наилучшее разрешение по энергии в 116.6 эВ при захвате от -3 до $+19$ временных отсчетов (обозначение $(-3, 19)$). Другой метод заключается в добавлении весов к амплитудам АЦП. Можно проверить метод, при котором вес пропорционален амплитуде, т. е. вычисляется $\sum x_i x_i / \sum x_i$. Взяв весь участок возрастания сигнала до максимума в 8 временных точек и 30 точек после максимума, мы получили разрешение 126 эВ. При варьировании интервала наилучшее разрешение 126 эВ получается при параметрах $(-3, 19)$ и $\sigma = 116.4$ эВ, что соответствует разрешению при простом суммировании в этом интервале и примерно на 10% хуже, чем для треугольного фильтра, рис. 5. В случае дифференцированного сигнала минимальное окно работы АЦП также должно составлять около 50 временных точек.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали применение цифровых фильтров для обработки сигналов "Троицк нью-масс". Для детектирования электронов и гамма-квантов с энергией до 20 кэВ был использован кремниевый детектор с 7 пикселями размером по 2 мм каждый. Целью работы была оптимизация параметров триггера при оцифровке с частотой 125 МГц в режиме прямого чтения АЦП. Калибровочные данные, снятые с гамма-изотопов Fe^{55} и Am^{241} анализировались с применением треугольного и трапецеидального цифровых фильтров. Треугольный фильтр с временем интегрирования от 16 временных точек АЦП

показал оптимальное разрешение по шуму и энергии. Наилучшее энергетическое разрешение гамма-линии 5.9 кэВ составило 110 эВ (сигма). Применение трапецеидального фильтра с шириной вершины до 24 точек (или 200 нс) не улучшило результат. Был сделан вывод, что треугольный фильтр шириной сторон по 16 временных точек удовлетворяет требованиям к триггеру и энергетическому разрешению. Также проведено исследование работы детектора с дифференцированным выходным сигналом. В этом режиме скользящее среднее по нескольким точкам минимизирует уровень шума при интегрировании по 12–15 временным точкам. Было исследовано несколько методов для улучшения энергетического разрешения в случае дифференцированного сигнала. Оказалось, что простое интегрирование по узкому временному интервалу вокруг максимума сигнала дает наилучшее энергетическое разрешение около 116 эВ. Минимальное окно для регистрации сигнала должно составлять около 50 временных точек АЦП.

Благодарности. Мы бы хотели поблагодарить наших коллег из Института физики Макса Планка в Мюнхене, и в особенности Сюзанну Мартенс, за их помощь на начальном этапе этой работы.

Финансирование. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2020-778).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Lechner et al., Nucl. Instr. Meth. A **458**, 281 (2001); doi.org/10.1016/S0168-9002(00)00872-X.
2. D. N. Abdurashitov et al., JINST **10**, T10005 (2015); doi:10.1088/1748-0221/10/10/T10005; arXiv:1504.00544; physics.ins-det.
3. A. I. Belesev et al., J. Phys. G **41**, 015001 (2014); doi:10.1088/0954-3899/41/1/015001; arXiv:1307.5687.
4. <https://www.xglab.it/products/cube-bias-boards/>
5. T. Brunst et al., JINST **14**, P11013 (2019); doi:10.1088/1748-0221/14/11/P11013.
6. V. D. Kekelidze et al., Eur. Phys. J. A **52**, 211 (2016); doi:10.1140/epja/i2016-16211-2.
7. A. Niculae et al., Nucl. Instr. Meth. A **568**, 336 (2006); doi:10.1016/j.nima.2006.06.025.
8. F. S. Goulding and D. A. Landis, IEEE Trans. Nucl. Sci. **35**, 119(1988); doi:10.1109/23.12687.

ОХЛАЖДЕНИЕ СТРУЙ ДЛЯ ТЯЖЕЛЫХ ФЛЕЙВОРОВ В АА- И pp -СТОЛКНОВЕНИЯХ

Б.Г. Захаров ^а

^а Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук
117940, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2022 г.,
после переработки 4 декабря 2022 г.
Принята к публикации 5 декабря 2022 г.

Проведен глобальный анализ экспериментальных данных по охлаждению струй для тяжелых флейворов для сценариев с образованием кварк-глюонной плазмы и без нее в pp -столкновениях. Найдено, что теоретические предсказания для фактора ядерной модификации R_{AA} для тяжелых флейворов при энергиях LHC для этих сценариев очень похожи, при этом результаты для R_{AA} и v_2 разумно согласуются с данными LHC. Согласие с данными при максимальной энергии RHIC становится несколько лучше для промежуточного сценария, в котором образование кварк-глюонной плазмы в pp -столкновениях происходит только при энергиях LHC. Наше фитирование R_{AA} для тяжелых флейворов показывает, что описание охлаждения струй для тяжелых флейворов требует несколько больших α_s , чем данные об охлаждении струй для легких адронов.

DOI: 10.31857/S0044451023050048
EDN: BCBCGF

1. ВВЕДЕНИЕ

Наблюдаемое подавление спектров адронов с большими p_T (охлаждение струй) при столкновениях ядро-ядро (АА) на RHIC и LHC является одним из основных сигналов образования деконфайнментной кварк-глюонной плазмы (КГП) в начальной стадии АА-столкновений. Охлаждение струй в АА-столкновениях происходит из-за радиационных [1–6] и столкновительных [7] потерь энергии быстрыми партонами, проходящими через фэйрбол из КГП. Основной вклад в потери энергии партонов вносит индуцированное глюонное излучение [6, 8]. Подавление спектров частиц в АА-столкновениях по сравнению с бинарно масштабированными спектрами в pp -столкновениях характеризуется фактором ядерной модификации R_{AA} . Экспериментально, для класса центральности Δc , R_{AA} определяется как

$$R_{AA} = \frac{d^2 N_{AA}/dp_T^2 dy}{N_{ev} \langle T_{AA} \rangle_{\Delta c} d^2 \sigma_{pp}/dp_T^2 dy}, \quad (1)$$

где N_{ev} — количество событий, $d^2 N_{AA}/dp_T^2 dy$ — выход частиц в АА-столкновениях, $\langle T_{AA} \rangle_{\Delta c}$ — усредненная (по классу центральности Δc) функция

ядерного перекрытия. Центральность s , которая характеризует перекрытие сталкивающихся ядер, экспериментально определяется через множественность заряженных адронов. Для столкновений тяжелых ионов с хорошей точностью центральность может быть записана через прицельный параметр b как $s \approx \pi b^2/\sigma_{in}^{AA}$ [9] (за исключением очень периферийных столкновений). Если предположить, что при столкновении протон-протон (pp) КГП не образуется, а экспериментальное инклюзивное pp -сечение в знаменателе (20) близко к инклюзивному pp -сечению, рассчитанному в рамках pQCD, $d^2 \sigma_{pp}^{pt}/dp_T^2 dy$, то теоретический коэффициент ядерной модификации может быть записан как

$$R_{AA} = \frac{\langle d^2 \sigma_{NN}^m/dp_T^2 dy \rangle_{\Delta c}}{d^2 \sigma_{pp}^{pt}/dp_T^2 dy}, \quad (2)$$

где $d^2 \sigma_{NN}^m/dp_T^2 dy$ — модифицированное средой инклюзивное нуклон-нуклонное сечение для заданной геометрии образования струи при АА-столкновении, а $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по геометрии рождения струи и по прицельному параметру для интервала центральности Δc .

Если формирование КГП происходит также и в pp -соударениях, то формула (2) становится неприменимой, поскольку в этом сценарии pp -сечение в знаменателе (20) зависит от эффектов среды, и в знаме-

нателе (2) вместо $pQCD$ pp -сечения следует использовать сечение, которое учитывает модификацию струи эффектами среды от взаимодействия в конечном состоянии в мини-КГП (мКГП). К настоящему времени были обнаружены несколько сигналов образования мКГП в pp -столкновениях в данных по рождению мягких адронов. Среди них наблюдение эффекта гребня [10,11] в pp -столкновениях при энергиях LHC, резкий рост образования странных частиц при $dN_{ch}/d\eta \sim 5$ [12]. Последний факт согласуется с началом режима КГП при $dN_{ch}/d\eta \sim 6$, предсказанном в [13] из экспериментальных данных о среднем значении p_T как функции множественности, с использованием аргументов Ван Хо-ва [14]. С точки зрения формирования мКГП важно, что в струйных pp -событиях множественность мягких (underlying-event (UE)) адронов больше в $\sim 2 - 2.5$ раза [15], чем множественность в pp -столкновениях с минимальным отбором (minimum bias). При энергиях LHC $dN_{ch}^{ue}/d\eta \sim 10 - 15$, что оказывается значительно выше расчетной критической плотности множественности $dN_{ch}/d\eta \sim 5$ для начала формирования мКГП в pp -столкновениях. Для pp -столкновений при максимальной энергии RHIC $\sqrt{s} = 0.2$ ТэВ мы имеем $dN_{ch}^{ue}/d\eta \sim 6$, что соответствует порядку ожидаемой множественности для начала режима формирования КГП. Таким образом, возможно, что для pp -столкновений при $\sqrt{s} = 0.2$ ТэВ динамика образующихся мягких адронов может быть близка к режиму свободного разлета, и, следовательно, эффекты охлаждения струй должны быть небольшими. Это означает, что для АА-столкновений на RHIC теоретическое значение R_{AA} должно определяться формулой (2).

Для сценария с рождением мКГП в pp -столкновениях реальное инклюзивное pp -сечение в знаменателе (20) включает эффекты охлаждения струй в файерболе мКГП, рожденном при pp -столкновении. Мы можем записать его как произведение теоретического $pQCD$ pp -сечения и среднего коэффициента модификации R_{pp} :

$$d^2\sigma_{pp}^m/dp_T^2 dy = R_{pp} d^2\sigma_{pp}^{pt}/dp_T^2 dy. \quad (3)$$

Физически $d^2\sigma_{pp}^m/dp_T^2 dy$ аналогично эффективному NN -сечению, входящему в числитель (2), но, в отличие от (2), теперь мы должны выполнить вычисления для файербола мКГП и выполнить усреднение по геометрии pp -столкновений. Таким образом, в сценарии с образованием мКГП в pp -соударениях теоретическое значение R_{AA} , по сравнению с формулой (2), оказывается увеличенным на коэффициент $1/R_{pp}$. Конечно, R_{pp} не является непосредственно

наблюдаемой величиной. Поскольку размер и температура файербола мКГП в pp -столкновениях должны быть небольшими, можно ожидать, что эффекты охлаждения должны быть небольшими, т.е. R_{pp} должно быть близко к единице. Это делает практически невозможным наблюдение охлаждения струй в pp -столкновениях из экспериментальных данных по p_T -зависимости спектров адронов. В [16] было показано, что измерение изменения с UE множественностью функций фрагментации (ФФ) помеченных фотоном/адроном струй, характеризующихся средовым коэффициентом модификации I_{pp} , может быть многообещающим методом для прямого наблюдения охлаждения струй в pp -столкновениях. Недавно коллаборация ALICE сообщила предварительные результаты [17] по коэффициенту модификации I_{pp} при $\sqrt{s} = 5.02$ ТэВ для струй, помеченных адроном (с импульсом триггерного адрона $8 < p_T < 15$ ГэВ и с импульсом ассоциированного адрона в противоположной стороне в диапазоне $4 < p_T < 6$ ГэВ), которые показывают монотонное уменьшение I_{pp} с множественностью UE примерно на 15–20% для диапазона плотности множественности UE $\sim 4 - 15$. В [18] было показано, что это разумно согласуется с теоретическими предсказаниями, полученными в рамках подхода интеграла по путям на световом конусе (light-cone path integral (LCPI)) [2] к индуцированной эмиссии глюонов. Наблюдение уменьшения I_{pp} с множественностью UE, если оно подтвердится, будет сильным аргументом в пользу сценария с рождением мКГП в струйных pp -событиях.

В свете возможности образования мКГП в pp -столкновениях представляет большой интерес провести анализ охлаждения струй в АА-столкновениях для такого сценария. В [19] мы выполнили глобальный анализ данных об охлаждении струй при АА-столкновениях для легких адронов для сценариев с образованием мКГП в pp -столкновениях и без него в рамках подхода LCPI [2] к индуцированному глюонному излучению. Мы использовали $\alpha_s(Q, T)$, которая имеет плато около $Q \sim Q_{fr} = \kappa T$ (такая параметризация мотивирована решеточными расчетами константы связи КХД в среде [20] и вычислениями в рамках функциональной ренормировочной группы [21]). Мы выбрали κ , используя данные LHC для тяжелых ионов по коэффициенту ядерной модификации R_{AA} при 2.76 и 5.02 ТэВ в (Pb+Pb)-столкновениях и при 5.44 ТэВ (Xe+Xe)-столкновениях. Вычисления таким методом позволяют избежать неоднозначности в выборе α_s для малых систем, поскольку параметр κ , подобранный по данным для столкновений

тяжелых ионов, автоматически фиксирует α_s для КГП небольшого размера. В [19] было обнаружено, что обе модели приводят к довольно хорошему описанию данных RHIC и LHC по R_{AA} для столкновений тяжелых ионов. Для данных по R_{AA} с RHIC от PHENIX согласие становится несколько лучше для сценария, когда в pp -столкновениях формирование мКГП происходит при энергиях LHC, но отсутствуют при энергиях RHIC.

Было бы интересно выяснить, согласуется ли сценарий с образованием мКГП в pp -столкновениях с данными об охлаждении струй также и для тяжелых флейворов. Охлаждение струй для тяжелых флейворов в последние годы привлекло большое теоретическое и экспериментальное внимание (в качестве недавнего обзора см. [22]). Первоначально ожидалось, что тяжелые кварки должны терять меньше энергии, чем легкие кварки, из-за подавления радиационных потерь энергии для тяжелых кварков мертвым конусом [23]. Однако более поздние эксперименты на RHIC [24, 25] обнаружили довольно сильное подавление одиночных электронов от распадов тяжелых мезонов, что, по-видимому, противоречит ожидаемому подавлению радиационных потерь энергии мертвым конусом (“heavy quark puzzle”). С теоретической стороны, в [26] в рамках подхода LCPI [2] к индуцированной эмиссии глюонов было обнаружено, что из-за квантовых эффектов конечного размера (игнорируемых в модели мертвого конуса [23]) при низких энергиях ($\lesssim 20\text{--}30$ ГэВ) подавление кварковой массой радиационных потерь энергии оказывается значительно меньшим, чем предсказывалось в модели мертвого конуса. Более того, при энергиях $\gtrsim 100$ ГэВ квантовые эффекты приводят к увеличению радиационных потерь энергии с увеличением массы кварка. В работах [27, 28] мы проанализировали первые данные об охлаждении струй для тяжелых флейворов с LHC в рамках подхода LCPI для сценария без образования мКГП при pp -столкновениях и получили разумное согласие с данными. К настоящему времени на LHC получено значительное количество экспериментальных данных по охлаждению струй для тяжелых флейворов. Это позволяет провести более детальное сравнение теории и эксперимента для охлаждения струй для тяжелых флейворов. В контексте “heavy quark puzzle” важно, что сценарий с образованием мКГП может приводить к некоторому снижению отношения факторов ядерной модификации R_{AA} для тяжелых и легких флейворов [29]. Это происходит из-за флейворной иерархии $R_{pp}^\pi < R_{pp}^D < R_{pp}^B$ [29], которая имеет место при

$p_T \lesssim 20$ ГэВ для энергии RHIC $\sqrt{s} = 0.2$ ТэВ и при $p_T \lesssim 70$ ГэВ для энергий LHC [29].

В настоящей работе мы расширяем анализ [19] охлаждения струй для легких адронов на случай тяжелых мезонов и тяжело-флейворных электронов (heavy flavor electrons (HFEs)). Как и в [19], мы вычисляем x -спектр индуцированного излучения глюонов, dP/dx (x — фракционный импульс глюона), в рамках подхода LCPI [2] (см. также [30], где содержится более недавнее обсуждение формализма LCPI). В этом подходе dP/dx выражается через решение двумерного уравнения Шредингера, которое автоматически учитывает все рассеяния быстрых партонов в среде. Мы вычисляем индуцированный глюонный спектр, используя форму, предложенную в [31]¹⁾. Мы вычисляем индуцированный глюонный спектр вне рамок приближения мягких глюонов. В литературе потери энергии тяжелых кварков обычно вычисляются в мягком глюонном приближении (см., например, [32–38]). Однако можно легко показать, что это приближение слишком грубо для анализа эффектов кварковой массы. Действительно, в двумерном уравнении Шредингера, которое определяет индуцированный глюонный x -спектр, масса кварка входит только через длину формирования [2]

$$L_f = \frac{x(1-x)E}{m_q^2 x^2 + m_g^2(1-x)}$$

(здесь E — начальная энергия кварка, $m_{q,g}$ — квази-частичные массы партонов). По этой причине масса кварка становится важной при

$$\frac{x^2}{1-x} \gtrsim \frac{m_g^2}{m_q^2}.$$

Взяв $m_g \sim 400$ МэВ [39], можно видеть, что для $c(b)$ -кварка это происходит при $x \gtrsim 0.3(0.1)$ (точные вычисления [26] подтверждают эти качественные оценки). Это говорит о том, что приближение мягких глюонов может быть неудовлетворительным для тяжелых флейворов (особенно для c -кварка). Отметим также, что наша схема точно учитывает кулоновские эффекты в партонных перерассеяниях (в отличие от имеющейся в литературе [34–36] пертурбативной трактовки кулоновских эффектов в качестве поправки к приближению гармонического осциллятора), которые очень важны для эффектов, связанных с кварковой массой [26].

¹⁾ В отличие от исходной формы LCPI индуцированного глюонного спектра в терминах сингулярных функций Грина [2], метод [31] сводит вычисление глюонного спектра к решению начально-краевой задачи с гладким начальным условием, что удобно для численных расчетов.

Статья посторена следующим образом. В разд. 2 мы кратко рассматриваем основные аспекты нашей модели. В разд. 3 мы представляем результаты для R_{pp} и сравнение наших результатов с экспериментальными данными для R_{AA} и для коэффициента эллиптического потока v_2 в AA -столкновениях. Раздел 4 представляет собой Заключение.

2. ОБЗОР МОДЕЛИ ОХЛАЖДЕНИЯ СТРУЙ

Мы используем схему охлаждения струй [40] в форме [41] с несколько улучшенной трактовкой многократного глюонного излучения и адаптированной для использования T -зависимой α_s (как в [19]). В этом разделе мы кратко обсудим основные особенности нашей теоретической схемы. Более подробную информацию можно найти в работах [19, 40, 41].

Для заданной геометрии AA -столкновения и образования струи мы записываем модифицированное средой жесткое сечение NN -столкновения в форме, аналогичной обычной формуле pQCD для NN -столкновений в вакууме

$$\frac{d\sigma^m(N + N \rightarrow h + X)}{d\mathbf{p}_T dy} = \sum_i \int_0^1 \frac{dz}{z^2} D_{h/i}^m(z, Q) \frac{d\sigma^{pt}(N + N \rightarrow i + X)}{d\mathbf{p}_T^i dy}, \quad (4)$$

где $d\sigma^{pt}(N + N \rightarrow i + X)/d\mathbf{p}_T^i dy$ — стандартное жесткое pQCD сечение рождения начального жесткого партона i с поперечным импульсом $\mathbf{p}_T^i = \mathbf{p}_T/z$, $D_{h/i}^m$ — модифицированная средой ФФ, описывающая рождение наблюдаемой частицы h при фрагментации начального жесткого партона i . Для шкалы начальной виртуальности Q мы используем партонный импульс p_T^i . Мы рассчитываем жесткие сечения, используя формулу pQCD лидирующего порядка с партонными функциями распределения СТЕQ6 [42]. Ядерная модификация партонных функций распределения для AA -столкновений учитывается поправкой EPS09 [43] (эта поправка дает небольшое отклонение R_{AA} от единицы даже без эффектов охлаждения струй). Чтобы имитировать эффекты более высоких порядков, аналогично генератору событий PYTHIA [44], мы вычисляем α_s для шкалы виртуальности cQ с $c = 0.265$. Это дает довольно хорошее описание p_T -зависимости спектров частиц для pp -столкновений (обратим внимание, что нормализация жестких сечений вообще не важна для R_{AA}).

Мы предполагаем, что стадия индуцированной эмиссии глюонов происходит после стадии DGLAP (это приближение является разумным, поскольку длина формирования для ведущего DGLAP вклада в эмиссию глюонов довольно мала [40]), а также, что формирование конечной частицы h происходит вне файерболла КГП. В этой схеме модифицированная в среде ФФ для перехода $i \rightarrow h$ может быть записана как

$$D_{h/i}^m(Q) \approx D_{h/j}(Q_0) \otimes D_{j/k}^{in} \otimes D_{k/i}(Q), \quad (5)$$

где $\otimes$ означает z -конволюцию, $D_{k/i}$ — DGLAP ФФ для партонного перехода $i \rightarrow k$, $D_{j/k}^{in}$ — ФФ для $j \rightarrow k$ внутрисредового партонного перехода в файерболле КГП, а $D_{h/j}$ описывает вакуумную фрагментацию партона j в конечную частицу h вне КГП. Мы вычисляли DGLAP ФФ, используя генератор событий PYTHIA [44].

В качестве ФФ тяжелых кварков для переходов $c \rightarrow D$ и $b \rightarrow B$ мы используем параметризацию Петерсона

$$D_{M/Q}(z) \propto \frac{1}{z[1 - (1/z) - \epsilon_Q/(1 - z)]^2} \quad (6)$$

с $\epsilon_c = 0.06$ и $\epsilon_b = 0.006$. Как и в [28], для HFEs мы записываем электронные z -распределения для перехода $Q \rightarrow e$ в виде свертки $D_{e/Q} = D_{e/M} \otimes D_{M/Q}$. Мы выражаем $D_{e/M}$ для распадов $M \rightarrow e^2$ через электронный импульсный спектр dB/dp в системе покоя тяжелого мезона

$$D_{e/M}(z, P) = \frac{P}{4} \int_0^\infty dq^2 \frac{\cosh(\phi - \theta)}{p^2 \cosh \phi} \frac{dB}{dp}, \quad (7)$$

где

$$p = \sqrt{(q^2 + m_e^2) \cosh^2(\phi - \theta) - m_e^2},$$

$$\theta = \operatorname{arcsinh}(P/M), \quad \phi = \operatorname{arcsinh}(zP/\sqrt{q^2 + m_e^2}),$$

P — импульс тяжелого мезона, а M — его масса. Для dB/dp в B/D -мезонных распадах мы используем электронные спектры из данных CLEO [46, 47]. Мы вычисляем z -распределения непрямых D -мезонов от распадов b -адронов, $D_{D/B}(z, P)$, используя форму аналогичную (7) (с заменой $m_e \rightarrow m_D$) с D -мезонным спектром dB/dp полученным коллаборацией BaBar [48].

Для численного расчета спектра излучения одного глюона dP/dx мы используем представление,

²⁾ Отметим, что мы не учитываем процесс $B \rightarrow D \rightarrow e$, так как он дает пренебрежимо малый вклад [45].

полученное в [31]. Для удобства читателя формулы для расчета dP/dx приведены в Приложении. Для масс тяжелых кварков мы берем $m_c = 1.2$ ГэВ и $m_b = 4.75$ ГэВ. Для квазичастичной массы глюона мы берем $m_g = 400$ МэВ [39] (как и в [19], для охлаждения струй для легких адронов). Как и в [19], мы рассчитываем дипольное сечение, которое необходимо для вычисления мнимого потенциала (14) в уравнении Шредингера для получения dP/dx , используя массу Дебая из решеточного моделирования [49].

Мы вычисляем ФФ $D_{j/k}^{in}$ для тяжелых кварков через одноглюонный спектр dP/dx в приближении независимого многократного излучения глюонов [50] таким же образом, как и в наших предыдущих анализах охлаждения струй для легких адронов (см. Приложение В в [41] для получения подробной информации). Как и в [19, 40], мы рассматриваем столкновительный механизм как возмущение к радиационному, переопределяя начальную температуру КГП при расчете модифицированных средой радиационных ФФ $D_{j/k}^{in}$. Мы рассчитываем столкновительные потери энергии, используя метод Бьеркена [7] с точной трактовкой кинематики процессов $2 \rightarrow 2$ (подробности можно найти в [8]).

Как и в [19], мы берем $\alpha_s(Q, T)$ в виде

$$\alpha_s(Q, T) = \begin{cases} \frac{4\pi}{9 \log(Q^2/\Lambda_{QCD}^2)}, & Q > Q_{fr}(T), \\ \alpha_s^{fr}(T), & Q_{fr}(T) \geq Q \geq cQ_{fr}(T), \\ \alpha_s^{fr}(T) \frac{Q}{cQ_{fr}(T)}, & Q < cQ_{fr}(T), \end{cases} \quad (8)$$

где $Q_{fr} = \Lambda_{QCD} \exp\{2\pi/9\alpha_s^{fr}\}$ (в настоящем анализе мы полагаем $\Lambda_{QCD} = 200$ МэВ), $c = 0.8$. Мы берем $Q_{fr} = \kappa T$ и выполняем фитирование свободного параметра κ , используя данные по ядерному фактору модификации R_{AA} для соударений тяжелых ионов. В пользу такого вида выражения (8) свидетельствуют результаты решеточных расчетов [20] α_s в среде.

Мы используем такую же модель файерболла КГП как в [19], с расширением КГП типа 1+1D Бьеркена [51] (которое ведет к плотности энтропии $s(\tau)/s(\tau_0) = \tau_0/\tau$, где τ_0 — время термализации) и плоским профилем энтропии по поперечным координатам. Мы берем $\tau_0 = 0.5$ Фм. Мы используем линейную параметризацию $s(\tau) = s(\tau_0)\tau/\tau_0$ при $\tau < \tau_0$. Для определения $s(\tau_0)$ в АА-соударениях мы используем предсказания модели Глаубера поврежденных нуклонов [52] с параметрами, полученными в наших глауберовских расчетах методом

Монте-Карло [53, 54] из фитирования данных по псевдобыстротной плотности множественности заряженных адронов $dN_{ch}/d\eta$ в АА-столкновениях с RHIC (для (Au+Au)-столкновений при 0.2 ТэВ) и с LHC (для (Pb+Pb)-столкновений при 2.76 и 5.02 ТэВ). Для отношения энтропия/множественность мы используем $(dS/dy)/(dN_{ch}/d\eta) \approx 7.67$ [55]. Наша модель Глаубера приводит к начальной температуре КГП (для КГП в виде идеального газа с $N_f = 2.5$) $T_0 \approx 320$ МэВ для центральных (Au+Au)-столкновений при $\sqrt{s} = 0.2$ ТэВ, $T_0 \approx 400(420)$ МэВ для центральных (Pb+Pb)-столкновений при $\sqrt{s} = 2.76(5.02)$ ТэВ (см. рис. 1 в [19]). Как и в [19], мы преобразуем миндалевидную область перекрытия двух сталкивающихся ядер в эллиптическую (той же площади), которая воспроизводит эксцентриситет файерболла ϵ_2 , полученный в рамках нашей Монте-Карло-версии модели Глаубера. Обратим внимание, что для Монте-Карло-версии модели Глаубера ϵ_2 не обращается в нуль для центральных столкновений (из-за флуктуаций плотности), в отличие от оптической модели Глаубера. Этот факт практически не имеет значения для R_{AA} , но важен для предсказаний азимутальной анизотропии v_2 (см. обсуждение в [19]).

Как и в [19], для КГП, рожденной в pp -столкновениях, мы используем модель эффективного файерболла (которая включает pp -столкновения со всеми прицельными параметрами). В этой схеме, используя данные о плотности зарядовой UE множественности $dN_{ch}^{ue}/d\eta$, для радиуса и начальной температуры T_0 файерболла мКГП, образованного в pp -столкновениях мы получаем [19]

$$R_f[\sqrt{s} = 0.2, 2.76, 5.02 \text{ ТэВ}] \approx [1.26, 1.44, 1.49] \text{ Фм}, \quad (9)$$

$$T_0[\sqrt{s} = 0.2, 2.76, 5.02 \text{ ТэВ}] \approx [195(226), 217(247), 226(256)] \text{ МэВ}. \quad (10)$$

В (10) мы приводим T_0 для случая энтропии идеального газа и для энтропии из решеточных расчетов [56] (числа в скобках).

Для pp -столкновений мы вычисляем модифицированные средой жесткие сечения таким же образом, как и для АА-столкновений. Мы вычисляем L -распределение длин траекторий струй в файерболле мКГП, используя распределение точек образования струй для плотности кварков модели мешка MIT (полагая одинаковыми плотности для кварков и глюонов).

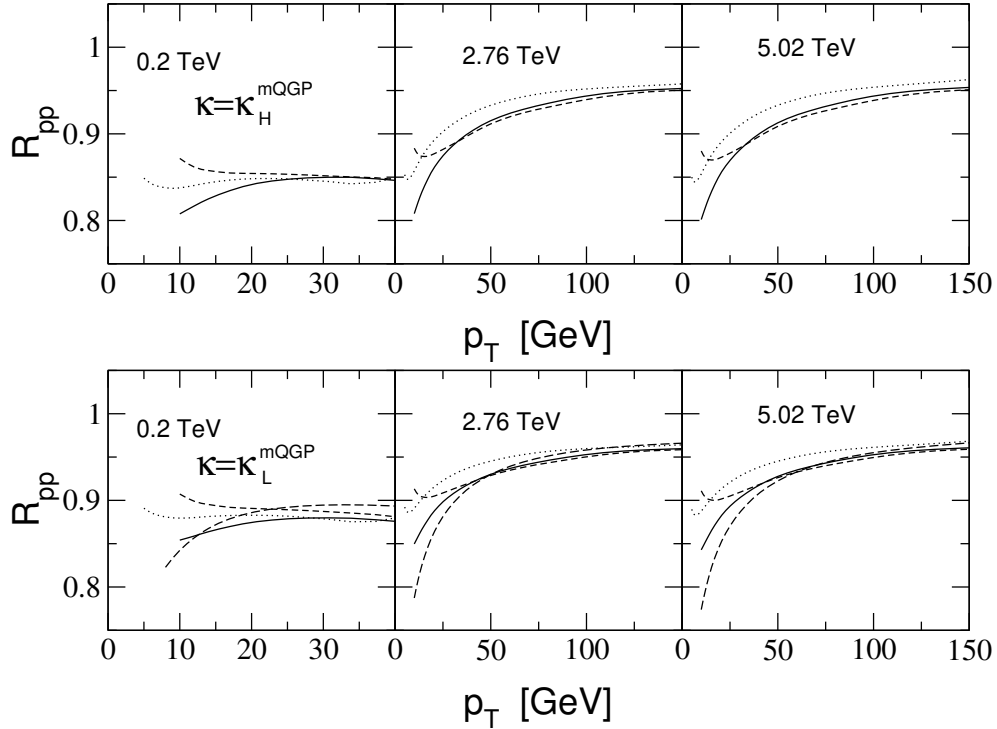


Рис. 1. R_{pp} для D -мезонов (сплошные), B -мезонов (штриховые) и HFEs (пунктирные) в pp -столкновениях при $\sqrt{s} = 0.2, 2.76$ и 5.02 ТэВ. На верхних(нижних) панелях кривые для $\kappa = \kappa_H^{mQGP}$ (κ_L^{mQGP}). На нижних панелях мы также приводим R_{pp} для заряженных адронов (длинные штрихи)

3. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

В этом разделе мы сравниваем предсказания модели с данными для фактора ядерной модификации R_{AA} и азимутальной анизотропии v_2 для тяжелых мезонов и HFEs. Мы представляем результаты для двух наборов оптимальных значений свободного параметра κ в параметризации (8) α_s . Первый набор (для версий с формированием мКГП в pp -соударениях и без него) оптимальных значений κ был получен с помощью χ^2 -подгонки данных с LHC по R_{AA} для D -мезонов [57–60] и HFEs [61, 62] (Pb+Pb)-соударений при 2.76 и 5.02 ТэВ с центральностью $\lesssim 50\%$. Мы использовали точки данных с $p_T \gtrsim 10$ ГэВ для D -мезонов и $p_T \gtrsim 5$ ГэВ для HFEs ³⁾. Фитирование данных для тяжелых флейворов дает $\kappa \approx 2(1.4)$ для версий без(с)

формированием мКГП в pp -столкновениях (далее мы обозначаем их как $\kappa_H(\kappa_H^{mQGP})$). Для оптимальных значений $\kappa_H(\kappa_H^{mQGP})$ мы получили в этих фитах $\chi^2/d.p. \approx 0.69(0.71)$ (χ^2 на одну точку данных). Для второго набора мы используем значения κ , полученные в [19] путем подгонки данных LHC по R_{AA} для заряженных адронов для (Pb+Pb)-столкновений при 2.76 и 5.02 ТэВ и (Xe+Xe)-столкновений при 5.44 ТэВ. Эти подгонки дают $\kappa \approx 3.4(2.5)$ для сценариев без(с) рождением мКГП в pp -столкновениях (в дальнейшем мы обозначаем их как $\kappa_L(\kappa_L^{mQGP})$). Для оптимальных значений $\kappa_L(\kappa_L^{mQGP})$, полученных путем подгонки R_{AA} для заряженных адронов, мы имеем для данных по тяжелым флейворам значения $\chi^2/d.p. \approx 1.95(1.45)$, которые показывают, что $\kappa_L(\kappa_L^{mQGP})$ также приводят к разумному согласию с экспериментальными данными по тяжелым флейворам.

На рис. 1 приведены результаты для R_{pp} , полученные для оптимальных значений $\kappa = \kappa_H^{mQGP}$ (верхние панели) и $\kappa = \kappa_L^{mQGP}$ (нижние панели) для $\sqrt{s} = 0.2, 2.76$ и 5.02 ТэВ. Чтобы продемонстрировать разницу между эффектами среды для тяжелых флейворов и легких адронов, на нижних панелях

³⁾ Для HFEs мы используем меньший нижний предел p_T , поскольку для HFEs из-за наличия дополнительной ФФ $D_{e/M}$ отношение типичного поперечного импульса исходных тяжелых кварков к поперечному импульсу конечной обнаруженной частицы для HFEs становится больше, чем для тяжелых мезонов, на фактор ~ 2 .

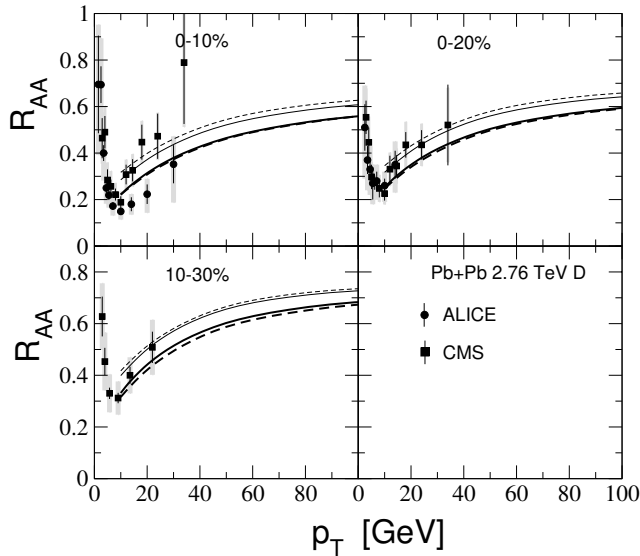


Рис. 2. R_{AA} для D -мезонов в (Pb+Pb)-столкновениях при $\sqrt{s} = 2.76$ ТэВ из наших вычислений для сценариев с (сплошные) и без (штриховые) рождения мКГП в pp -столкновениях для оптимальных параметров κ_H^{mQGP} (κ_H) (толстые линии) и κ_L^{mQGP} (κ_L) (тонкие линии). Точки — данные ALICE [57] и CMS [58]

мы также привели R_{pp} для заряженных адронов. Из рис. 1 видно, что разница между R_{pp} для тяжелых флейворов при энергиях LHC для L и H версий параметра κ становится небольшой при $p_T \gtrsim 30$ ГэВ. А при $p_T \sim 10 - 20$ ГэВ для оптимальных значений $\kappa_H(\kappa_H^{mQGP})$ для тяжелых флейворов величина $|R_{pp} - 1|$ больше, чем для $\kappa_L(\kappa_L^{mQGP})$ на $\sim 20 - 25\%$. Как видно из рис. 1, для энергий LHC R_{pp} для тяжелых мезонов и легких адронов становятся почти одинаковыми при $p_T \gtrsim 30$ ГэВ.

На рис. 2 приведено сравнение наших результатов для R_{AA} для D -мезонов с данными LHC от ALICE [57] для (Pb+Pb)-столкновений при 2.76 ТэВ. Показаны кривые для сценариев с (сплошные) и без (штриховые) образования мКГП в pp -столкновениях для оптимальных значений κ , полученных из данных LHC по R_{AA} для тяжелых флейворов (толстые линии) и по R_{AA} для легких адронов (тонкие линии). На рис. 3 приведено сравнение наших результатов для R_{AA} для D - и B -мезонов для (Pb+Pb)-столкновений при 5.02 ТэВ с данными от ALICE [59] и CMS [60, 63]. Результаты по R_{AA} для D -мезонов, показанные на рис. 2 и 3, чувствительны к потере энергии c -кварка. Мы также вычислили R_{AA} для D -мезонов от распадов B -адронов (непрямые D), который чувствителен к потере энергии b кварка. На рис. 4 показано сравнение наших резуль-

татов для R_{AA} для непрямых D -мезонов в (Pb+Pb)-столкновениях при 5.02 ТэВ с данными ALICE [64] и CMS [65]. На рис. 5 приведено сравнение результатов для отношения $R_{AA}^{nonprompt}/R_{AA}^{prompt}$ с данными ALICE [64]. Из рис. 3–5 видно, что модель разумно описывает разницу в силе охлаждения струй для прямых и непрямых D -мезонов (которая чувствительна к зависимости потери энергии от массы кварка). На рис. 6 и 7 сравниваются наши результаты для R_{AA} HFes при (Pb+Pb)-столкновениях при 2.76 и 5.02 ТэВ с данными ALICE [61, 62]. Эти рисунки соответствуют ядерному подавлению спектра всех HFes, который включает распады $c \rightarrow e$ и $b \rightarrow e$. На рис. 8 приведено сравнение наших вычислений R_{AA} для каналов $b \rightarrow e$ и $c \rightarrow e$ отдельно с данными ALICE [66] для канала $b \rightarrow e$ и с результатами анализа [67] в рамках метода, основанного на выделении вклада чарм- и бьюти-кварков непосредственно из адронных данных.

Из рис. 2–8 видно, что разница между теоретическими R_{AA} для D - и B -мезонов и HFes для сценариев с образованием в pp -столкновениях мКГП и без нее невелика. Можно видеть, что для $\kappa_H(\kappa_H^{mQGP})$ и $\kappa_L(\kappa_L^{mQGP})$ результаты показывают разумное согласие с экспериментальными данными. Обратим внимание, что результаты, показанные на рис. 3–5 и 8, демонстрируют, что модель разумно воспроизводит относительную силу охлаждения струй для чарм- и боттом-кварков (т.е. модель разумно воспроизводит эффекты массы кварков).

На рис. 9 приведено сравнение наших результатов для v_2 прямых и непрямых D -мезонов в (Pb+Pb)-столкновениях при 5.02 ТэВ с данными ALICE [68] и CMS [69, 70]. К сожалению, экспериментальные ошибки слишком велики, чтобы сделать окончательный вывод о согласии с данными. Из рис. 9 видно, что относительный эффект формирования мКГП в pp -столкновениях на теоретические предсказания для v_2 более выражен, чем для R_{AA} . Это происходит потому, что сценарий с формированием мКГП в pp -столкновениях требует несколько более сильного охлаждения струй для спектров частиц, чем без образования мКГП в pp -столкновениях (чтобы компенсировать влияние фактора $1/R_{pp}$ на R_{AA}). Как следствие, для сценария с формированием мКГП мы имеем большую азимутальную анизотропию v_2 , на которую фактор $1/R_{pp}$ не влияет.

На рис. 10 приведено сравнение наших результатов для R_{AA} для D -мезонов в (Au+Au)-столкновениях при 0.2 ТэВ с данным STAR [71]. На этом рисунке, в дополнение к сценариям с образованием мКГП в pp -столкновениях и без него, мы также представ-

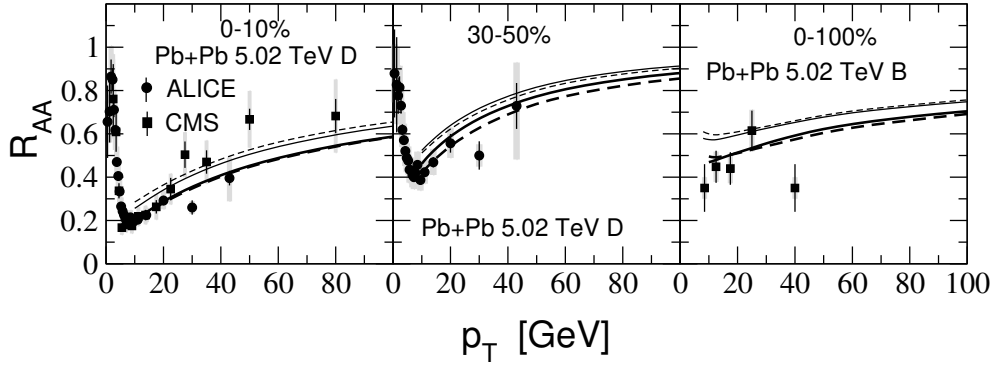


Рис. 3. R_{AA} для D -мезонов (левая и средняя панели) и B -мезонов (правая панель) для $(Pb+Pb)$ -столкновений при $\sqrt{s}=5.02$ ТэВ. Кривые такие же, как на рис. 2. Точки — данные для D -мезонов от ALICE [59] и CMS [60] и для B -мезонов от CMS [63]

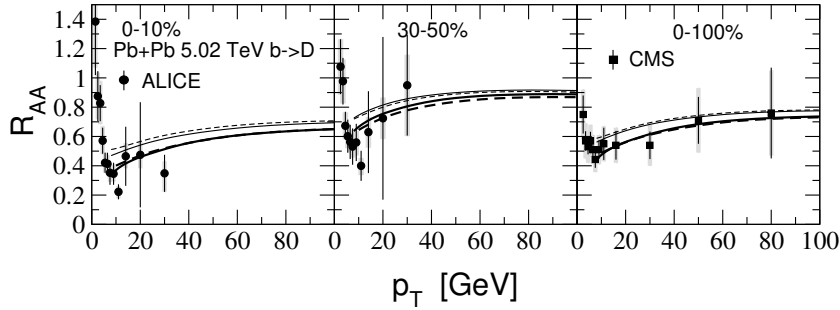


Рис. 4. R_{AA} для не прямых D -мезонов от распадов $B \rightarrow D^0$. Кривые такие же, как на рис. 2. Точки — данные ALICE [64] и CMS [65]

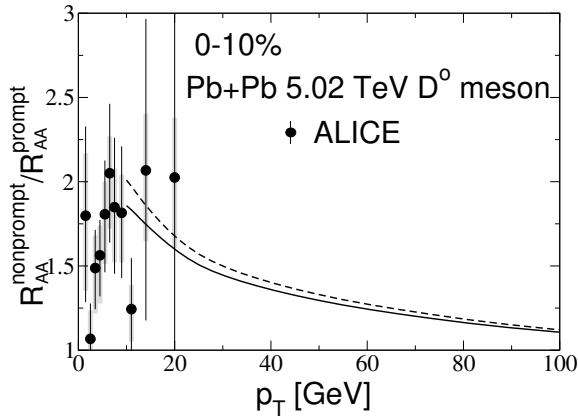


Рис. 5. Отношение R_{AA} для не прямых и прямых D^0 -мезонов в зависимости от p_T в 0–10% центральных $(Pb+Pb)$ -соударениях при $\sqrt{s}=5.02$ ТэВ из наших вычислений для сценариев с (сплошная) и без (штриховая) образования мКГП в pp -столкновениях для оптимальных параметров κ_H^{mQGP} и κ_H . Точки — данные ALICE [64]

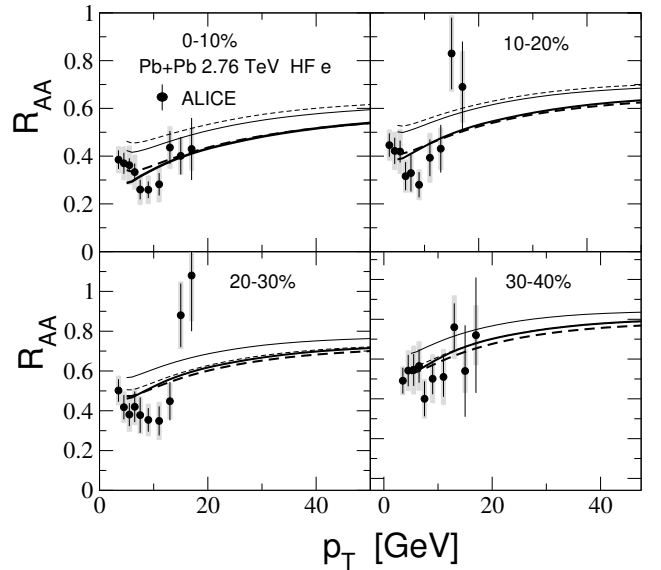


Рис. 6. То же самое, что на рис. 2, для HFEs при $\sqrt{s}=2.76$ ТэВ. Точки — данные ALICE [61]

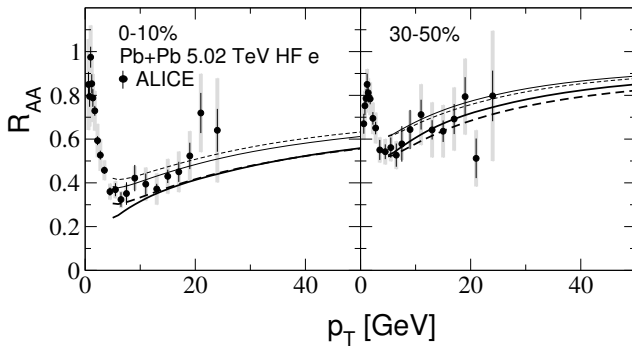


Рис. 7. То же самое, что на рис. 6, при $\sqrt{s}=5.02$ ТэВ. Точки — данные ALICE [62]

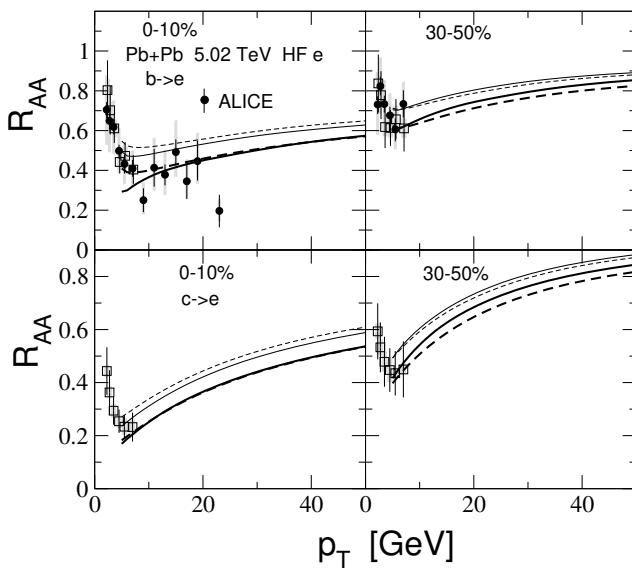


Рис. 8. R_{AA} для электронов от распадов боттом-кварков (верхние панели) и чарм-кварков (нижние панели) кварков в (Pb+Pb)-соударениях при $\sqrt{s} = 5.02$ ТэВ. Кривые как на рис. 2. Точки — данные ALICE [66] (кружки) и из анализа [67] (квадраты) в рамках метода, основанного на выделении вклада чарм- и бьюти-кварков непосредственно из адронных данных

ляем предсказания для промежуточного сценария, в котором образование мКГП в pp -столкновениях происходит только при энергиях ЛНС. В этом сценарии R_{AA} для (Au+Au)-столкновений при 0.2 ТэВ следует вычислять без коэффициента $1/R_{pp}$ для оптимального κ , подогнанного по данным ЛНС по R_{AA} для сценария с рождением мКГП в pp -столкновениях (т.е. для $\kappa = \kappa_{L,H}^{mQGP}$). К сожалению, данные STAR [71] ограничены довольно низкими поперечными импульсами, где применимость нашей модели может быть сомнительной. Из рис. 10 видно, что для максимального поперечного импуль-

са ($p_T \sim 8$ ГэВ) в данных STAR наши результаты, в пределах ошибок, согласуются с экспериментальными данными. Мы получаем несколько лучшее согласие с данными для промежуточного сценария с образованием мКГП в pp -столкновениях только при энергиях ЛНС.

На рис. 11 мы сравниваем наши предсказания для R_{AA} для HFEs от распадов $b+c \rightarrow e$ при 0.2 ТэВ (Au+Au)-столкновениях с данными RHIC от STAR [24] и PHENIX [72]. На рис. 12 показано сравнение с данными по R_{AA} от STAR [73] для полного электронного спектра ($b+c \rightarrow e$) и отдельно для каналов $b \rightarrow e$ и $c \rightarrow e$. Из рис. 11 и 12 можно видеть, что для R_{AA} для HFEs, как и в случае результатов для R_{AA} для D -мезонов, показанных на рис. 10, согласие с экспериментальными данными становится несколько лучше для промежуточного сценария с образованием мКГП в pp -столкновениях только при энергиях ЛНС. Однако определенный вывод не может быть сделан, учитывая большие экспериментальные ошибки и очень ограниченный диапазон p_T ($p_T \lesssim 8$ ГэВ) в этих данных.

Таким образом, из рис. 2–12 мы можем заключить, что в целом наши теоретические результаты для сценариев с образованием мКГП и без него в pp -столкновениях разумно согласуются с экспериментальными данными по охлаждению струй для тяжелых флейворов. Однако наши подгонки R_{AA} для тяжелых флейворов дают меньшие значения κ , чем для легких адронов, т.е. данные об охлаждении струй для тяжелых флейворов требуют несколько больших α_s , чем данные по охлаждению струй для легких адронов. Это несоответствие может быть связано с приближениями, используемыми при расчетах R_{AA} по спектру излучения одного глюона. Одной из возможных причин является использование приближения независимого излучения глюонов [50] для многократного глюонного излучения. Можно ожидать, что это приближение становится менее надежным для глюонов. Поскольку при энергиях ЛНС вклад глюонов в спектр легких адронов с высоким p_T велик, ясно, что разные уровни неточности этого приближения для кварков и глюонов могут приводить к несоответствию оптимальных значений κ , соответствующих данным для R_{AA} для тяжелых флейворов и легких адронов. Кроме того, некоторое несоответствие между оптимальным κ для тяжелых флейворов и легких адронов может возникать из-за приближения плоской плотности файерболла, поскольку это приближение может несколько переоценивать эффект приграничного глюонного излучения, которое становится сильнее для глюонов.

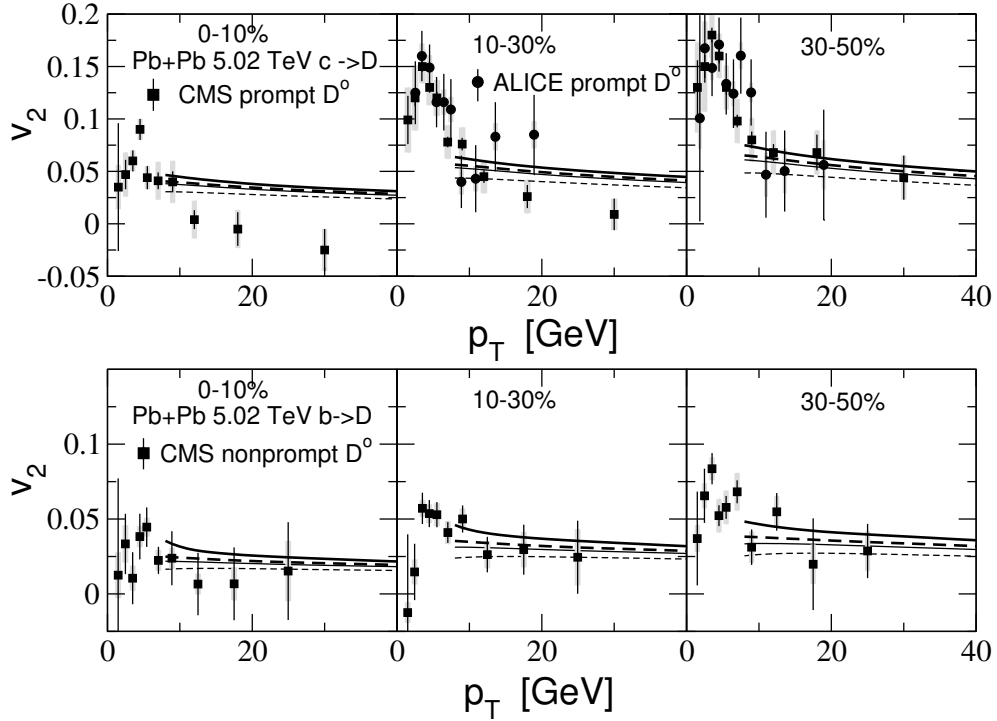


Рис. 9. v_2 для прямых (верхние панели) и непрямых (нижние панели) D -мезонов в $(Pb+Pb)$ -соударениях при $\sqrt{s}=5.02$ ТэВ. Кривые как на рис. 2. Точки — данные ALICE [68] и CMS [69, 70]

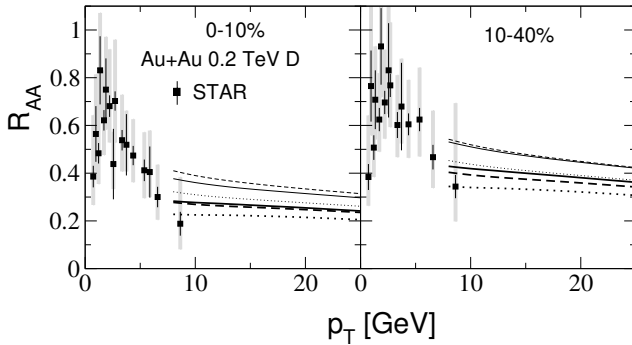


Рис. 10. R_{AA} для D^0 -мезонов в $(Au+Au)$ -соударениях при $\sqrt{s} = 200$ ГэВ для 0–10% (левая панель) и 10–40% (правая панель) интервалов центральности. Сплошные и штриховые как на рис. 2. Пунктирные кривые показывают результаты для сценария без образования мКГП в pp -соударениях, полученные для параметров κ_L^{mQGP} (тонкие линии) и κ_H^{mQGP} (толстые линии). Точки — данные STAR [71]

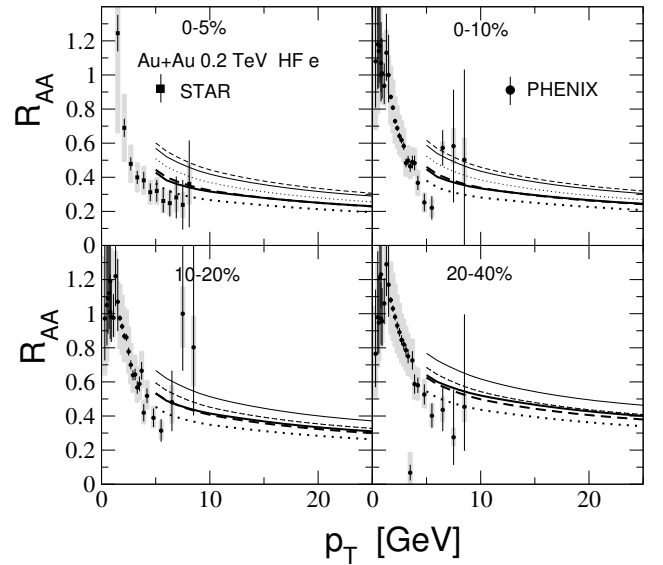


Рис. 11. То же самое, что на рис. 10, для HFEs. Точки — данные STAR [24] и PHENIX [72]

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье мы представили результаты глобального анализа экспериментальных данных по охлаждению струй для тяжелых флейворов (для D -мезонов, B -мезонов и HFEs) в рамках подхо-

да LCPI [2] к индуцированной эмиссии глюонов для сценариев с образованием мКГП и без него в pp -столкновениях. Настоящий анализ распространяет на тяжелые флейворы наше предыдущее ис-

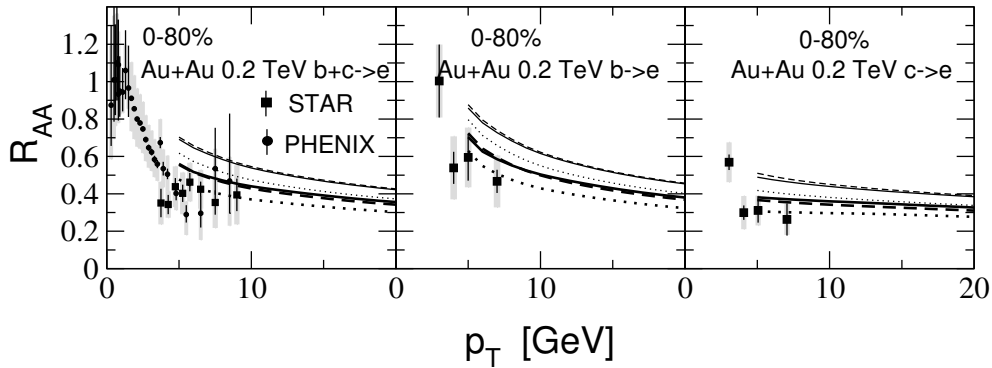


Рис. 12. R_{AA} для HFEs в (Au+Au)-столкновениях при $\sqrt{s} = 0.2$ ТэВ для интервала центральности 0–80%. Инклюзивный $b + c \rightarrow e$ R_{AA} (левая панель). R_{AA} для боттомных распадных электронов (средняя панель). R_{AA} для чармовых распадных электронов (правая панель). Кривые как на рис. 10. Точки — данные PHENIX [72] и STAR [73]

следование охлаждения струй для легких адронов [19]. Как и в [19], мы выполняем вычисления для зависящей от температуры бегущей $\alpha_s(Q, T)$, которая имеет плато около $Q \sim Q_{fr} = \kappa T$. Такая параметризация мотивирована решеточными расчетами [20] константы связи КХД в КГП. Мы выполнили вычисления для двух наборов оптимальных значений параметра κ . Для первого набора мы используем κ , подобранное по данным ЛНС по R_{AA} для тяжелых флейворов в (Pb+Pb)-столкновениях при 2.76 и 5.02 ТэВ, а для второго набора мы используем κ , подобранное по данным ЛНС по R_{AA} легких адронов при 2.76 и 5.02 ТэВ в (Pb+Pb)-столкновениях и при 5.44 ТэВ в (Xe+Xe)-столкновениях. Мы обнаружили, что подгонки по R_{AA} для тяжелых флейворов дают меньшие значения κ , чем для легких адронов, т.е. данные об охлаждении струй для тяжелых флейворов требуют несколько больших α_s , чем данные об охлаждении струй для легких адронов. Но разница в качестве согласия теоретических результатов с экспериментальными данными для тяжелых флейворов для двух наборов κ незначительна.

Найдено, что теоретические предсказания для фактора ядерной модификации R_{AA} для тяжелых флейворов при энергиях ЛНС для сценариев с образованием мКГП в pp -столкновениях и без него очень похожи, но влияние образования мКГП в pp -столкновениях на предсказания для азимутальной асимметрии v_2 является более выраженным. Результаты для R_{AA} и v_2 разумно согласуются с данными ЛНС как для κ , подогнанных по R_{AA} для тяжелых флейворов, так и по R_{AA} для легких адронов. Модель разумно воспроизводит экспериментальную относительную величину охлаждения струй для чарм- и боттом-кварков (т.е. она разумно

воспроизводит эффекты кварковой массы).

Отметим, что, аналогично результатам нашего анализа охлаждения струй для легких адронов [19], из сравнения с данными RHIC по R_{AA} для D -мезонов и HFEs мы находим, что согласие с данными при энергиях RHIC становится несколько лучше для промежуточного сценария, в котором образование мКГП в pp -столкновениях происходит только при энергиях ЛНС. Это также подтверждается нашим анализом [18] данных ALICE [17] о зависимости от UE множественности среднего фактора модификации I_{pp} .

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Государственной программой 0033-2019-0005.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В Приложении для удобства читателя приведены формулы для расчета x -спектра глюонного излучения dP/dx . Мы используем представление индуцированного глюонного спектра, полученное в работе [31] с включением T -зависимой бегущей α_s по методу [74]. Для быстрого кварка с импульсом вдоль оси z , рожденного при $z = 0$ в материи толщины L , dP/dx имеет вид

$$\frac{dP}{dx} = \int_0^L dz n(z) \frac{d\sigma_{eff}^{BH}(x, z)}{dx}, \quad (11)$$

где $n(z)$ — числовая плотность среды, $d\sigma_{eff}^{BH}/dx$ — эффективное сечение Бете–Гайтлера для процесса $q \rightarrow gq$, определяемое формулой

$$\frac{d\sigma_{eff}^{BH}(x, z)}{dx} = -\frac{P_q^g(x)}{\pi M} \text{Im} \int_0^z d\xi \times \\ \times \sqrt{\alpha_s(Q(\xi), T(z-\xi))\alpha_s(Q(\xi), T(z+\xi))} \times \\ \times \exp\left(-i\frac{\xi}{L_f}\right) \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{F(\xi, \rho)}{\sqrt{\rho}} \right) \Big|_{\rho=0}. \quad (12)$$

Здесь

$$P_q^g(x) = \frac{4}{3} \frac{1 + (1-x)^2}{x}$$

— обычная pQCD $q \rightarrow g$ функция расщепления,

$$M = E_q x(1-x),$$

$$L_f = 2M/\epsilon^2, \quad \epsilon^2 = m_q^2 x^2 + m_g^2(1-x),$$

$$Q^2(\xi) = aM/\xi, \quad a \approx 1.85$$

(см. [8]), F — решение радиального уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial F(\xi, \rho)}{\partial \xi} = \left[-\frac{1}{2M} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \right)^2 + v(\rho, x, z - \xi) + \right. \\ \left. + \frac{4m^2 - 1}{8M\rho^2} \right] F(\xi, \rho) \quad (13)$$

с азимутальным квантовым числом $m = 1$ и граничным условием

$$F(\xi = 0, \rho) = \sqrt{\rho} \sigma_{gq\bar{q}}(\rho, x, z) \epsilon K_1(\epsilon \rho) \quad \text{при } \xi = 0,$$

K_1 — функция Бесселя. Потенциал v имеет вид

$$v(\rho, x, z) = -i \frac{n(z) \sigma_{gq\bar{q}}(\rho, x, z)}{2}, \quad (14)$$

где $\sigma_{gq\bar{q}}(\rho, x, z)$ — трехчастичное сечение взаимодействия системы $gq\bar{q}$ с конститuentом среды в точке z (ρ — поперечное расстояние между g и конечным кварком q). В поперечной плоскости $\bar{q}$ расположен в центре масс пары gq . $\sigma_{gq\bar{q}}$ может быть выражено через локальное дипольное сечение $\sigma_{q\bar{q}}(\rho, z)$ (для синглетной по цвету $q\bar{q}$ пары)

$$\sigma_{gq\bar{q}}(\rho, x, z) \Big|_{q \rightarrow gq} = \frac{9}{8} [\sigma_{q\bar{q}}(\rho, z) + \sigma_{q\bar{q}}((1-x)\rho, z)] - \\ - \frac{1}{8} \sigma_{q\bar{q}}(x\rho, z). \quad (15)$$

В двухглюонном приближении дипольное сечение имеет вид

$$\sigma_{q\bar{q}}(\rho, z) = C_T C_F \int d\mathbf{q} \alpha_s^2(q, T(z)) \frac{[1 - \exp(i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho})]}{[q^2 + \mu_D^2(z)]^2}, \quad (16)$$

где $C_{F,T}$ — цветовые факторы Казимира для кварка и партонa среды (кварка или глюона), а $\mu_D(z)$ — локальная масса Дебая.

Для фajerбола КГП в AA -соударениях координата z совпадает с собственным временем τ , т.е. в терминах реальной числовой плотности фajerбола, $n_f(\boldsymbol{\rho}, \tau)$, мы имеем $n(z) = n_f(\boldsymbol{\rho}_j(\boldsymbol{\rho}_{j0}, \tau), \tau)$, где $\boldsymbol{\rho}_{j0}$ — поперечная координата точки рождения струи, а $\boldsymbol{\rho}_j(\boldsymbol{\rho}_{j0}, \tau) = \boldsymbol{\rho}_{j0} + \tau \mathbf{p}_T / |\mathbf{p}_T|$ — траектория струи. Мы используем приближение однородного фajerбола. В этом случае внутри фajerбола функция $n_f(\boldsymbol{\rho}, \tau)$ не зависит от точки образования струи. Это значительно снижает вычислительные затраты, поскольку можно один раз свести в таблицу L -зависимость индуцированного глюонного спектра, а затем использовать ее для расчетов $\Phi\Phi$ для произвольной геометрии струи.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Baier, Y.L. Dokshitzer, A.H. Mueller, S. Peigné, and D. Schiff, Nucl. Phys. B **483**, 291 (1997) [arXiv:hep-ph/9607355].
2. B.G. Zakharov, JETP Lett. **63**, 952 (1996) [arXiv:hep-ph/9607440].
3. U.A. Wiedemann, Nucl. Phys. A **690**, 731 (2001) [arXiv:hep-ph/0008241].
4. M. Gyulassy, P. Lévai, and I. Vitev, Nucl. Phys. B **594**, 371 (2001) [arXiv:hep-ph/0006010].
5. P. Arnold, G.D. Moore, and L.G. Yaffe, JHEP **0206**, 030 (2002) [arXiv:hep-ph/0204343].
6. R. Baier, D. Schiff, and B.G. Zakharov, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **50**, 37 (2000) [arXiv:hep-ph/0002198].
7. J.D. Bjorken, Fermilab preprint 82/59-THY (1982, unpublished).
8. B.G. Zakharov, JETP Lett. **86**, 444 (2007) [arXiv:0708.0816].
9. W. Broniowski and W. Florkowski, Phys. Rev. C **65**, 024905 (2002) [arXiv:nucl-th/0110020].
10. V. Khachatryan et al. [CMS Collaboration], JHEP **1009**, 091 (2010) [arXiv:1009.4122].
11. G. Aad et al. [ATLAS Collaboration], Phys. Rev. Lett. **116**, 172301 (2016) [arXiv:1509.04776].

12. J. Adam et al. [ALICE Collaboration], *Nature Phys.* **13**, 535 (2017) [arXiv:1606.07424].
13. R. Campanini, G. Ferri, and G. Ferri, *Phys. Lett. B* **703**, 237 (2011), [arXiv:1106.2008].
14. L. Van Hove, *Phys. Lett. B* **118**, 138 (1982).
15. R. Field, *Acta Phys. Polon. B* **42**, 2631 (2011) [arXiv:1110.5530].
16. B.G. Zakharov, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 032301 (2014) [arXiv:1307.3674].
17. S. Tripathy [for ALICE Collaboration], arXiv:2103.07218.
18. B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **116**, 347 (2022) [arXiv:2208.10339].
19. B.G. Zakharov, *JHEP* **09**, 087 (2021) [arXiv:2105.09350].
20. A. Bazavov et al., *Phys. Rev. D* **98**, 054511 (2018) [arXiv:1804.10600].
21. J. Braun and H. Gies, *Phys. Lett. B* **645**, 53 (2007) [arXiv:hep-ph/0512085].
22. L. Apolinário, Y.-J. Lee, and M. Winn, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **127**, 103990 (2022) [arXiv:2203.16352].
23. Y.L. Dokshitzer and D.E. Kharzeev, *Phys. Lett. B* **519**, 199 (2001) [arXiv:hep-ph/0106202].
24. B.I. Abelev et al. [STAR Collaboration], *Phys. Rev. Lett.* **98**, 192301 (2007), Erratum-ibid. 106 (2011) 159902 [arXiv:nucl-ex/0607012].
25. S.S. Adler et al. [PHENIX Collaboration], *Phys. Rev. Lett.* **96**, 032301 (2006).
26. P. Aurenche and B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **90**, 237 (2009) [arXiv:0907.1918].
27. B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **96**, 616 (2013) [arXiv:1210.4148].
28. B.G. Zakharov, *J. Phys. G* **40**, 085003 (2013) [arXiv:1304.5742].
29. B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **103**, 363 (2016) [arXiv:1509.07020].
30. B.G. Zakharov, *JETP* **129**, 521 (2019) [arXiv:1912.04875].
31. B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **80**, 617 (2004) [arXiv:hep-ph/0410321].
32. S. Shi, J. Liao, and M. Gyulassy, *Chin. Phys. C* **43**, 044101 (2019) [arXiv:1808.05461].
33. D. Zigic, B. Ilic, M. Djordjevic, and M. Djordjevic, *Phys. Rev. C* **101**, 064909 (2020) [arXiv:1908.11866].
34. B. Blok and K. Tywoniuk, *Eur. Phys. J. C* **79**, 560 (2019) [arXiv:1901.07864].
35. B. Blok, *Eur. Phys. J. C* **80**, 729 (2020) [arXiv:2002.11233].
36. B. Blok, *Eur. Phys. J. C* **81**, 832 (2021) [arXiv:2009.00465].
37. R. Rapp, P.B. Gossiaux, A. Andronic, R. Averbeck, S. Masciocchi, A. Beraudo, E. Bratkovskaya, P. Braun-Munzinger, S. Cao, A. Dainese, S.K. Das, M. Djordjevic, V. Greco, M. He, H. van Hees, G. Inghirami, O. Kaczmarek, Y.-J. Lee, J. Liao, S.Y.F. Liu, G. Moore, M. Nahrgang, J. Pawlowski, P. Petreczky, S. Plumari, F. Prino, S. Shi, T. Song, J. Stachel, I. Vitev, and X.-N. Wang, *Nucl. Phys. A* **979**, 21 (2018) [arXiv:1803.03824].
38. Zhong-Bo Kang, F. Ringer, and I. Vitev, *JHEP* **03**, 146 (2017) [arXiv:1610.02043].
39. P. Lévai and U. Heinz, *Phys. Rev. C* **57**, 1879 (1998) [arXiv:hep-ph/9710463].
40. B.G. Zakharov, *JETP Lett.* **88**, 781 (2008) [arXiv:0811.0445].
41. B.G. Zakharov, *J. Phys. G* **48**, 055009 (2021) [arXiv:2007.09772].
42. S. Kretzer, H.L. Lai, F. Olness, and W.K. Tung, *Phys. Rev. D* **69**, 114005 (2004) [arXiv:hep-ph/0307022].
43. K.J. Eskola, H. Paukkunen, and C.A. Salgado, *JHEP* **0904**, 065 (2009) [arXiv:0902.4154].
44. T. Sjostrand, L. Lonnblad, S. Mrenna, and P. Skands, arXiv:hep-ph/0308153.
45. M. Cacciari, P. Nason, and R. Vogt, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 122001 (2005).
46. A.H. Mahmood et al. [CLEO Collaboration], *Phys. Rev. D* **70**, 032003 (2004).
47. R. Poling, invited talk at 4th Flavor Physics and CP Violation Conference, Vancouver, British Columbia, Canada, 9-12 Apr 2006, arXiv:hep-ex/0606016.

48. B. Aubert et al. [BaBar Collaboration], Phys. Rev. D **75**, 072002 (2007) [arXiv:hep-ex/0606026].
49. O. Kaczmarek and F. Zantow, Phys. Rev. D **71**, 114510 (2005) [arXiv:hep-lat/0503017].
50. R. Baier, Y.L. Dokshitzer, A.H. Mueller, and D. Schiff, JHEP **0109**, 033 (2001) [arXiv:hep-ph/0106347].
51. J.D. Bjorken, Phys. Rev. D **27**, 140 (1983).
52. D. Kharzeev and M. Nardi, Phys. Lett. B **507**, 121 (2001) [arXiv:nucl-th/0012025].
53. B.G. Zakharov, JETP **124**, 860 (2017) [arXiv:1611.05825].
54. B.G. Zakharov, Eur. Phys. J. C **78**, 427 (2018) [arXiv:1804.05405].
55. B. Müller and K. Rajagopal, Eur. Phys. J. C **43**, 15 (2005) [arXiv:hep-ph/0502174].
56. S. Borsanyi, G. Endrodi, Z. Fodor, A. Jakovac, S.D. Katz, S. Krieg, C. Ratti, and K. K. Szabo, JHEP **1011**, 077 (2010) [arXiv:1007.2580].
57. J. Adam et al. [ALICE Collaboration], JHEP **03**, 081 (2016) [arXiv:1509.06888].
58. Tech. Rep. CMS-PAS-HIN-15-005 CERN Geneva; <https://cds.cern.ch/record/2055466/files/HIN-15-005-pas.pdf> (2015)
59. S. Acharya et al. [ALICE Collaboration], JHEP **01**, 174 (2022) [arXiv:2110.09420].
60. A.M. Sirunyan et al. [CMS Collaboration], Phys. Lett. B **782**, 474 (2018) [arXiv:1708.04962].
61. J. Adam et al. [ALICE Collaboration], Phys. Lett. B **771**, 467 (2017) [arXiv:1609.07104].
62. S. Acharya et al. [ALICE Collaboration], Phys. Lett. B **804**, 135377 (2020) [arXiv:1910.09110].
63. A.M. Sirunyan et al. [CMS Collaboration], Phys. Rev. Lett. **119**, 152301 (2017) [arXiv:1705.04727].
64. S. Acharya et al. [ALICE Collaboration], 2202.00815.
65. A.M. Sirunyan et al. [CMS Collaboration], Phys. Rev. Lett. **123**, 022001 (2019) [arXiv:1810.11102].
66. J. Park, [for the ALICE Collaboration], PoS HardProbes2020, 034 (2021); doi:10.22323/1.387.0034.
67. D. Li, F. Si, Y. Zhao, P. Zhou, Y. Zhang, X. Li, and C. Yang, Phys. Lett. B **832**, 137249 (2022) [arXiv:2110.08769].
68. S. Acharya et al. [ALICE Collaboration], JHEP **02**, 150 (2019) [arXiv:1809.09371].
69. A.M. Sirunyan et al. [CMS Collaboration], Phys. Lett. B **816**, 136253 (2021) [arXiv:2009.12628].
70. Tech. Rep. CMS-PAS-HIN-21-003 CERN Geneva; <https://cds.cern.ch/record/2806157/files/HIN-21-003-pas.pdf> (2021).
71. J. Adam et al. [STAR Collaboration], Phys. Rev. C **99**, 034908 (2019) [arXiv:1812.10224].
72. A. Adare et al. [PHENIX Collaboration], Phys. Rev. C **84**, 044905 (2011) [arXiv:1005.1627].
73. M.S. Abdallah et al. [STAR Collaboration], arXiv:2111.14615.
74. B.G. Zakharov, JETP Lett. **112**, 681 (2020) [arXiv:2011.01526].

ЧЕРНАЯ ДЫРА И ТЕМНАЯ МАТЕРИЯ В СИНХРОННОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Б. Э. Мейерович ^{a*}

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

Поступила в редакцию 16 декабря 2022 г.,
после переработки 16 декабря 2022 г.
Принята к публикации 22 декабря 2022 г.

Статическое состояние черной дыры во взаимодействии с темной материей рассмотрено в синхронной системе координат. Также как и в координатах Шварцшильда, в синхронных координатах существует регулярное статическое сферически симметричное решение системы уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона, описывающее состояние материи, предельно сжатой собственным гравитационным полем. Также нет ограничения на массу. Также существуют два гравитационных радиуса, с граничными условиями на которых, решения не являются единственными. В отличие от координат Шварцшильда, в синхронных координатах определитель метрического тензора и компонента $g^{11}(r)$ не обращаются в нуль на гравитационных радиусах. В синхронных координатах, в отличие от координат Шварцшильда, в сферическом слое между гравитационными радиусами сигнатура метрического тензора не нарушена. В синхронных координатах уравнения Эйнштейна и Клейна–Гордона сводятся к системе второго (а не четвертого) порядка. Решения получены аналитически, так что численных расчетов не потребовалось. Определен гравитационный дефект массы в модели $\lambda\psi^4$. Полная масса материи оказывается вдвое больше массы Шварцшильда, определяемой удаленным наблюдателем при сопоставлении с гравитацией Ньютона.

DOI: 10.31857/S004445102305005X
EDN: BDKUFJ

1. ВВЕДЕНИЕ. В КООРДИНАТАХ ШВАРЦШИЛЬДА

При рассмотрении гравитационного поля, создаваемого сферически симметричной материей, принято исходить из метрики Шварцшильда [1]:

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k = e^{2F_0} (dx^0)^2 - e^{2F_1} dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (1)$$

В этих координатах на расстоянии от центра

$$\rho(r) = \int_0^r e^{F_1(x)} dx$$

длина окружности в плоскости $\theta = \pi/2$ равна $2\pi r$. Экспоненциальное представление $g_{11} = -e^{2F_1}$ и

$g_{00} = e^{2F_0}$ фиксирует знаки компонент метрического тензора $g_{00} > 0$, $g_{11} < 0$ и детерминанта $g = \det g_{ik} < 0$. Мы все строго следовали гипотезе Эйнштейна. Вот цитата из его статьи [2]: "Если окажется, что в каком-нибудь месте четырехмерного континуума $\sqrt{-g}$ обращается в нуль, то это будет означать, что в этом месте конечному координатному объему соответствует бесконечно малый естественный объем. Будем считать, что этого нигде нет. В таком случае g не может менять свой знак; мы примем, в соответствии со специальной теорией относительности, что g всегда имеет конечное и отрицательное значение. Это допущение является некоторой гипотезой о физической природе рассматриваемого континуума и в то же время правилом, касающимся выбора системы координат." Конец цитаты.

Обращение детерминанта метрического тензора в нуль не обязательно связано с наличием физической особенности. Это может быть спецификой выбранной системы отсчета. Например, в плоской сферической метрике

$$ds^2 = (dx^0)^2 - dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2)$$

* E-mail: meierovich@mail.ru

определитель

$$\det g_{ik} = -r^4 \sin^2 \theta$$

обращается в нуль в центре $r = 0$ и на полюсах $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. А в декартовых координатах везде $\det g_{ik} = -1$, так что физической особенности ни в центре, ни на полюсах нет.

Полагая в метрике (1)

$$g_{11} = -e^{2F_1},$$

мы фиксируем знак компоненты g_{11} . Тем самым, не заботясь о наличии или отсутствии особенности, мы исключаем из рассмотрения возможность $g_{11} > 0$ как якобы нефизическую. При этом система координат оказывается неполной [3–5]. Возникает критическая масса M_{cr} (для нейтронных звезд порядка массы Солнца), так что при $M > M_{cr}$ регулярных статических решений уравнений Эйнштейна не существует [6–8]. Решение Шварцшильда [1]

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) (dx^0)^2 - \frac{dr^2}{1 - r_g/r} - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) \quad (2)$$

не является регулярным в центре $r = 0$, хотя и описывает гравитационное поле в вакууме вдали от сферически симметричной материи независимо от массы

$$M = \frac{c^2}{2k} r_g,$$

наблюдаемой удаленным наблюдателем. При $M < M_{cr}$ метрика (2) асимптотически совпадает с регулярным решением в статье [5] при $r \gg r_g$.

Считается, что объекты с массой больше критической подвержены неограниченному сжатию [9]. Отсутствие в метрике (1) статических решений для объектов с массой больше критической не вяжется с существованием в центре нашей галактики Млечный Путь объекта с массой на 7 порядков больше массы Солнца [10]. Неограниченно сжимающиеся объекты в центрах галактик принято называть черными дырами. Черные дыры в центрах галактик, как и сами галактики, существуют столь же долго, сколько существует Вселенная. Если считать, что сжатие безостановочно, то в центрах галактик мы встречаемся с сингулярностью вопреки гипотезе Эйнштейна, что этого нигде нет. Если учесть, что в процессе коллапса с ростом давления происходят химические реакции превращения нейтронов в более "элементарные частицы", то это может замедлить и даже остановить сжатие. Чтобы найти регулярное статическое решение без ограничения массы,

описывающее состояние материи к которому может привести коллапс, пришлось отказаться от фиксирующего знак представления $g_{11} = -e^{2F_1}$. Достаточно ограничиться более слабым условием регулярности: все инварианты метрического тензора конечны. Компоненты метрического тензора g_{ik} и определитель $\det g_{ik}$, а также их знаки, не инвариантны относительно преобразований координат.

При поиске статического решения уравнений Эйнштейна, описывающего то состояние, к которому может привести гравитационный коллапс, естественно считать, что гравитационное взаимодействие является доминирующим, но не нарушающим квантовых свойств материи. То есть бозоны остаются бозонами, а фермионы — фермионами. В соответствии с принципом исключительности Паули, при нулевой температуре в равновесии фермионы поодиночке заполняют все квантовые состояния, начиная от основного и кончая уровнем Ферми, занимаемого последним фермионом. При массе $M < M_{cr}$ в статическом состоянии гравитационное сжатие скомпенсировано упругостью фермионов. При $M > M_{cr}$ упругости фермионов не достаточно чтобы сдерживать силу гравитационного сжатия. Для вырожденного релятивистского ферми-газа критическая масса $M_{crf} \sim M_{Pl}^3/m_f^2$ [8]. Масса Планка $M_{Pl} = \sqrt{\hbar c/k} = 2.177 \cdot 10^{-5}$ г, m_f — масса фермиона, k — гравитационная постоянная. Для нейтронных звезд (масса нейтрона $m_f = 1.67 \cdot 10^{-24}$ г) критическая масса $M_{crf} \sim 10^{33}$ г — порядка массы Солнца.

Статическое состояние бозонной материи энергетически более предпочтительно, чем фермионной. В отличие от фермионов, все бозоны в равновесии при нулевой температуре находятся в основном состоянии. Это ультра квантовое состояние материи называется конденсатом Бозе-Эйнштейна. В равновесии концентрации частиц, вступающих в реакции превращения одних в другие, зависят от температуры и давления, и не зависят от каналов реакции ([11], §101). Если исходить из современной Стандартной Модели элементарных частиц [12], то в состоянии равновесия доминирующими могут быть массивные Z и W бозоны, скалярный бозон Хиггса, а также бозонные квазичастицы спаренных фермионов (эффект Купера [13]). Волновой функцией конденсата нейтральных бозонов является классическое скалярное поле ([14], §30). Лагранжиан L комплексного скалярного поля ψ имеет вид

$$L = g^{ik} \psi_{,i}^* \psi_{,k} - U(\psi^* \psi).$$

При большой массе конденсата в разложении потенциала

$$U(|\psi|^2) = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 |\psi|^2 + \frac{1}{2} \lambda |\psi|^4 + \dots \quad (3)$$

основным является первый член — источник гравитации, m — масса покоя бозона. Если в потенциале (3) оставить только первый член разложения, то это значит, что рассматривается конденсат, состоящий из идеального газа невзаимодействующих бозонов. Второй и следующие члены — поправки, учитывающие негравитационные взаимодействия бозонов, включая упругость конденсата. Учет только первых двух членов разложения в потенциале (3) с $\lambda = \text{const}$ — это феноменологическая модель. Ее можно назвать " $\lambda\psi^4$ ".

Равновесие гравитирующего скалярного поля рассматривалось в ряде работ применительно к черным дырам и гипотетическим бозонным звездам, см. [15–19] и ссылки в них. Как и у фермионов, с ограничением $g_{11} = -e^{2F_1}$ равновесие гравитирующего вырожденного бозе газа существует, только если масса M конденсата меньше критической массы $M_{crb} \sim M_{Pl}^2/m_b$ [20]. Для массивных бозонов Стандартной Модели (с массой покоя m_b около 100 ГэВ/с²) критическая масса конденсата бозонов $M_{crb} \sim 10^{12}$ г. Это всего лишь порядка миллиона тон.

Я позволил себе проверить, что получится, если отказаться от ограничения $g_{11} = -e^{2F_1}$, фиксирующего знак минус. Оказывается, без этого ограничения статическое решение системы уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона с массой $M > M_{cr}$ существует [21]. В координатах Шварцшильда в этом решении имеют место два реальных гравитационных радиуса. Метрическая компонента $g^{rr}(r)$ дважды меняет знак: при $r = r_g$ внутри конденсата, и при $r = r_h > r_g$ на его поверхности. В сферическом слое $r_g < r < r_h$ компонента $g^{rr}(r) > 0$, и сигнатурой метрики становится $(+, +, -, -)$.

Из уравнения Эйнштейна ([22], уравнение (100.6))

$$(g^{rr})' + (1 + g^{rr})/r = \kappa r T_0^0 \quad (4)$$

следует, что если сфера $r = r_h$ является поверхностью конденсата, то есть плотность энергии $\varepsilon(r) = T_0^0(r) \neq 0$ при $r < r_h$ и $T_0^0(r) = 0$ при $r \geq r_h$, то

$$g^{rr}(r_h) = 0, \\ \frac{dg^{rr}(r_h)}{dr} = -\frac{1}{r_h}.$$

Из другого уравнения Эйнштейна ([22], уравнение (100.4))

$$g^{rr}(1 - r(\lg g^{00})') + 1 = \kappa r^2 T_r^r \quad (5)$$

видно, что поскольку $g^{rr}(r_h) = 0$, давление

$$p(r_h) = -T_r^r(r_h) = -1/\kappa r_h^2$$

не обращается в нуль на поверхности конденсата. Отрицательное давление означает, что гравитационные силы направлены на сжатие газа бозонов, а не на разлет.

На сфере $r = r_h$ черная дыра граничит с темной материей. Наблюдаемые проявления темной материи, такие как кривые вращения галактик, адекватно описываются продольным векторным полем [23]. Ковариантная дивергенция векторного поля — это скаляр, удовлетворяющий уравнению Клейна–Гордона также как и скалярная волновая функция бозе-конденсата, но только с другой массой кванта. Можно пошутить, что дивергенция продольного поля темной материи — это волновая функция бозе-конденсата, вывернутая наизнанку. Условие непрерывности давления на границе раздела позволило определить зависимость скорости на плато вращения галактики от массы черной дыры (формула (68) в [21]).

Если в потенциале (3) оставить только первый член разложения (приближение идеального бозе-газа без учета упругости), то волновая функция конденсата расходится логарифмически в центре [21]. Регулярное в центре статическое решение системы уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона с массой $M > M_{cr}$ существует в модели $\lambda\psi^4$ при наличии баланса упругости и плотности конденсата [24]. В координатах Шварцшильда система уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона, приведенная к каноническому виду, состоит из четырех уравнений первого порядка, разрешенных относительно производных (уравнения (21)–(24) в работе [24]). Правые части этих уравнений не удовлетворяют условиям теоремы существования и единственности на сферах $r = r_g$ и $r = r_h$, где $g^{rr} = 0$. Решение с граничными условиями регулярности в центре $r = 0$ существует, но оно является единственным только в интервале $0 \leq r < r_g$. Решение с граничными условиями на сферах $r = r_g$ и $r = r_h$ не являются единственными. Эта свобода позволяет найти решение с любой массой $M > M_{cr}$, а также обеспечить баланс на границе черной дыры с темной материей.

В координатах Шварцшильда в модели $\lambda\psi^4$ статические состояния черной дыры определяются дву-

мя свободными параметрами. Один из них λ характеризует упругость конденсата. λ однозначно задает плотность конденсата в центре и внутренний гравитационный радиус r_g . Внутри сферы $r < r_g$ уравнением состояния конденсата является

$$p = -\varepsilon/3, \quad (6)$$

а плотность энергии ε и метрическая компонента g^{00} не зависят от r . Второй свободный параметр обеспечивает существование регулярного статического решения с произвольной массой M в диапазоне $M_{cr} < M < \infty$ [25].

2. В СИНХРОННОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Система отсчета, в которой $g_{00} = 1$, $g_{0\alpha} = 0$, называется синхронной ([22], §97). В этом параграфе показано, что, с одной стороны, перейти к синхронной системе отсчета можно в любом пространстве-времени. С другой стороны, утверждается, что заполняющая пространство материя не может, вообще говоря, покоиться относительно синхронной системы отсчета. Исключение может иметь место лишь в частных случаях. Это утверждение основано на том, что в синхронной системе отсчета в статике компонента тензора Риччи $R_0^0 = 0$, а выражение в правой стороне уравнения Эйнштейна

$$R_0^0 = \kappa (T_0^0 - T/2) = \kappa (\varepsilon + 3p)/2 \quad (7)$$

при любом распределении материи положительно. Обратим внимание, что давление p положительно, когда материя стремится к расширению, и отрицательно, когда материя стремится к сжатию. С точки зрения, изложенной в [22], §97, состояние конденсата, сжатого до ультрарелятивистского предела (6) собственным гравитационным полем, можно рассматривать как "исключение в частном случае".

Еще со времен Эддингтона [26] и Лемэтра [27] известно, что гравитационный радиус r_g , на котором в метрике Шварцшильда компонента $g^{rr}(r_g) = 0$, не является физической особенностью. В задаче 4 к §100 в [22] приведено преобразование метрики Шварцшильда (2) к конформно-евклидовому виду. Не единственность решения системы уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона с граничными условиями именно на гравитационных радиусах $r = r_g$ и $r = r_h$, где $g^{rr}(r) = 0$ является особенностью метрики Шварцшильда [25]. В конформно-евклидовом виде $g^{rr}(r)$ в нуль не обращается.

В синхронной системе отсчета статическая сферически симметричная метрика

$$ds^2 = (dx^0)^2 - e^{2F_1(r)} dr^2 - e^{2F_2(r)} (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) \quad (8)$$

содержит две функции $F_1(r)$ и $F_2(r)$, зависящие от одной координаты r , при этом

$$\int_0^r e^{F_1(r)} dr$$

— расстояние от центра. В отличие от метрики Шварцшильда (1), длина центральной окружности равна не $2\pi r$, а $2\pi e^{F_2(r)}$. В синхронной системе отсчета важную роль играют радиусы $r = r_g$ и $r = r_h$, с граничными условиями на которых решения системы уравнений Эйнштейна и Клейна–Гордона не являются единственными. Однако теперь компонента $g^{11}(r)$ не обращается в нуль на сферах $r = r_g$ и $r = r_h$. Поэтому, как это привычно всем, в метрике (8) я могу использовать экспоненциальные представления

$$g_{11}(r) = -e^{2F_1(r)}, \quad g_{22}(r) = -e^{2F_2(r)}.$$

Подстановкой

$$dx = e^{F_1(r)} dr, \quad x(r) = \int_{r_0}^r e^{F_1(r)} dr, \quad F_2(r) = F_2(x(r)) \quad (9)$$

метрика (8) приводится к виду, содержащему всего одну функцию $F_2(x)$:

$$ds^2 = (dx^0)^2 - dx^2 - e^{2F_2(x)} (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (10)$$

В метрике (10) координата x является истинным расстоянием от центра. Тензор Риччи диагональный:

$$\begin{aligned} R_0^0 &= 0, \\ R_1^1 &= 2(F_2'^2 + F_2''), \\ R_2^2 &= R_3^3 = 2F_2'^2 + F_2'' - e^{-2F_2}. \end{aligned} \quad (11)$$

В независимом от времени гравитационном поле энергия является интегралом движения. Волновая функция конденсата бозонов в состоянии с определенной энергией E на частицу

$$\psi_E(x^0, x) = e^{iEx^0/\hbar c} \psi(x)$$

удовлетворяет уравнению Клейна–Гордона

$$\frac{1}{\sqrt{-\det g_{ik}}} \left(\sqrt{-\det g_{ik}} g^{lm} \psi_{,l} \right)_{;m} = -\frac{\partial U}{\partial |\psi|^2} \psi.$$

Радиальная часть $\psi(x)$ волновой функции $\psi_E(x^0, x)$ подчиняется уравнению

$$\psi'' + 2F_2'\psi' = \left[\left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 + \lambda |\psi|^2 - \left(\frac{E}{\hbar c} \right)^2 \right] \psi. \quad (12)$$

В отличие от метрики Шварцшильда, в этом уравнении коэффициент при старшей производной (равный единице) нигде не обращается в ноль.

Лагранжиан скалярного поля

$$L = g^{ik} \psi_{,i}^* \psi_{,k} - U(\psi^* \psi)$$

не зависит от производных метрического тензора g_{ik} . Тензор энергии-импульса конденсата легко вычисляется по формуле

$$T_{ik} = -g_{ik}L + 2\partial L/\partial g_{ik}.$$

Получим

$$\begin{aligned} T_0^0 &= \left(\frac{E^2 + m^2 c^4}{(\hbar c)^2} + \frac{1}{2} \lambda |\psi|^2 \right) |\psi|^2 + |\psi'|^2, \\ T_1^1 &= \left(-\frac{E^2 - m^2 c^4}{(\hbar c)^2} + \frac{1}{2} \lambda |\psi|^2 \right) |\psi|^2 - |\psi'|^2, \\ T_2^2 &= T_3^3 = \left(-\frac{E^2 - m^2 c^4}{(\hbar c)^2} + \frac{1}{2} \lambda |\psi|^2 \right) |\psi|^2 + |\psi'|^2. \end{aligned}$$

В синхронной системе отсчета $R_0^0 = 0$ (11). Поэтому удобно работать с уравнениями Эйнштейна в представлении

$$R_k^i = \kappa \left(T_k^i - \frac{1}{2} \delta_k^i T \right), \quad \kappa = \frac{8\pi}{c^4} k, \quad (13)$$

$k = 6.67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/(\text{г} \cdot \text{с}^2)$ — гравитационная постоянная. Поскольку $R_0^0 = 0$ (11), из уравнения (13) следует:

$$T_0^0 - \frac{1}{2}T = \left(\frac{2E^2 - m^2 c^4}{(\hbar c)^2} - \frac{1}{2} \lambda |\psi|^2 \right) |\psi|^2 = 0. \quad (14)$$

В формуле (14) E^2 , λ и $m^2 c^4$ постоянные величины. Поэтому волновая функция конденсата ψ тоже является константой:

$$\psi = \text{const}, \quad \psi' = 0. \quad (15)$$

Из соотношений (12) и (14) с учетом (15) определяется энергия бозона E в связанном основном состоянии и баланс упругости Λ с плотностью $|\psi|^2$ конденсата:

$$E^2 = \frac{1}{3} m^2 c^4, \quad \Lambda |\psi|^2 = -\frac{2}{3}. \quad (16)$$

$\Lambda = (\hbar/mc)^2 \lambda$ — параметр, характеризующий упругость конденсата в модели $\lambda\psi^4$. С учетом (16), тензор энергии-импульса конденсата

$$T_0^0 \equiv \varepsilon = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 |\psi|^2, \quad (17)$$

$$T_k^i \equiv -\delta_k^i p = \frac{1}{3} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 |\psi|^2, \quad i > 0,$$

соответствует уравнению состояния $p = -\varepsilon/3$ материи, сжатой ее собственным гравитационным полем до ультрарелятивистского предела. Уравнения Эйнштейна (13) с тензором Риччи (11) и тензором энергии-импульса (17)

$$2(F_2'^2 + F_2'') = -2\kappa |p|, \quad (18)$$

$$2F_2'^2 + F_2'' - e^{-2F_2} = -2\kappa |p| \quad (19)$$

определяют метрическую функцию $F_2(x)$. Эти уравнения не независимы. Исключаем F_2'' , а также вычитаем (19) из (18). Получаем

$$F_2'^2 - e^{-2F_2} = -\kappa |p|, \quad (20)$$

$$F_2'' + e^{-2F_2} = 0. \quad (21)$$

Поскольку $\psi = \text{const}$ (15), плотность энергии ε и давление p (17) тоже константы. Так что уравнение (21) — это продифференцированное уравнение (20).

Умножением на e^{2F_2} уравнение (20) приводится к виду

$$\frac{de^{F_2}}{dx} = \sqrt{1 - \kappa |p| (e^{F_2})^2}. \quad (22)$$

Частная производная

$$\frac{\partial \sqrt{1 - \kappa |p| (e^{F_2})^2}}{\partial e^{F_2}}$$

терпит разрыв при $e^{F_2} = (\kappa |p|)^{-1/2}$. Согласно теореме существования и единственности (см. [28], §3) $e^{F_2} = (\kappa |p|)^{-1/2}$ является решением уравнения (22). Но оно не единственное:

$$e^{F_2} = \frac{1}{\sqrt{\kappa |p|}} \sin \left(\sqrt{\kappa |p|} (x - x_0) \right)$$

тоже является решением уравнения (22), здесь x_0 — константа интегрирования. Компоненте $g_{22}(x) = -e^{2F_2(x)}$ метрики (10) присущи два решения: независимая от x константа

$$g_{22}(x) = -(\kappa |p|)^{-1}$$

и осциллирующая функция

$$g_{22}(x) = -(\kappa |p|)^{-1} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa |p|} (x - x_0) \right),$$

которые периодически совпадают при

$$x = x_0 + (\kappa |p|)^{-1/2} \pi (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

В соответствии с (9), в общем решении для метрики (8) осциллирующее решение

$$g_{22}(r) = -(\kappa |p|)^{-1} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa |p|} \int_{r_0}^r e^{F_1(x)} dx \right) \quad (23)$$

содержит произвольную функцию $F_1(x)$, r_0 — константа интегрирования. При $-p = \varepsilon/3 \rightarrow 0$ (в вакууме) решение (23) устанавливает в метрике

$$ds^2 = (dx^0)^2 + g_{11}(r) dr^2 + g_{22}(r) (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2)$$

связь $g_{11}(r)$ с $g_{22}(r)$:

$$g_{11} = \frac{1}{4} \frac{(g'_{22})^2}{g_{22}}, \quad g_{22}(r) = - \left(\int_{r_0}^r \sqrt{-g_{11}(x)} dx \right)^2.$$

Одна из этих двух функций произвольная.

Как и в координатах Шварцшильда, условием регулярности в центре является $g_{11}(0) = -1$. Из формулы (23) видно, что при этом условии $g_{22}(r) \rightarrow -r^2$ при $r \rightarrow 0$, и отношение длины окружности к радиусу стремится к 2π .

В конкретном случае $F_1(x) = 0$ решением, регулярным в центре, является

$$g_{22}(r) = -e^{2F_2(r)} = -\frac{1}{\kappa |p|} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa |p|} r \right). \quad (24)$$

Оно является единственным только в интервале $0 \leq r < r_g$. Здесь

$$r_g = \frac{\pi}{2\sqrt{\kappa |p|}} \quad (25)$$

— внутренний гравитационный радиус. В области $r > r_g$ уравнению (22) с граничным условием $e^{2F_2(r_g)} = 1/\kappa |p|$ удовлетворяют оба решения,

$$g_{22}(r) = -\frac{1}{\kappa |p|} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa |p|} r \right)$$

и

$$g_{22}(r) = -\frac{1}{\kappa |p|}.$$

Решение в синхронной системе отсчета

$$g_{22}(r) = -e^{2F_2(r)} = \begin{cases} -\frac{1}{\kappa |p|} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa |p|} r \right), & r < r_g, \\ -\frac{1}{\kappa |p|}, & r \geq r_g, \end{cases} \quad (26)$$

— это то же аналитическое решение, что и формула (41) в [24] в координатах Шварцшильда. В этом можно убедиться, положив в формуле (23) $g_{22}(r) = -r^2$ и разрешить это уравнение относительно $e^{F_1(x)}$. Получится

$$g^{11}(x) = -e^{-2F_1(x)} = -1 + \frac{\kappa \varepsilon}{3} x^2,$$

как в формуле (41) в [24] (с точностью до обозначений).

И в метрике Шварцшильда, и в синхронной метрике, внутренний гравитационный радиус r_g — это граница центральной области, в которой решение является единственным и независимым от массы всего конденсата. В области $r > r_g$ решение с граничным условием $g_{22}(r_g) = (\kappa |p|)^{-1}$ не является единственным. Эта неоднозначность позволяет выбрать решение, соответствующее данной массе конденсата. Разница состоит в том, что в координатах Шварцшильда в точках ветвления r_g и r_h метрическая компонента $g^{11}(r) = 0$, а в синхронной системе отсчета (10) $g^{11}(r) = -1$ и нигде в нуль не обращается.

В метрике

$$ds^2 = (dx^0)^2 - dr^2 + g_{22}(r) (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2)$$

корень детерминанта $\sqrt{-\det g_{ik}} = |g_{22}(r)| \sin \theta$. Полная масса внутри сферы радиуса r получается интегрированием компоненты $T^0_0 \equiv \varepsilon$:

$$M(r) = \frac{1}{c^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^r T^0_0(r) |g_{22}(r)| dr. \quad (27)$$

Согласно (26) интегрирование (27) в области $r < r_g$ дает

$$M(r) = \frac{2\varepsilon}{c^2} \left(\pi r - r_g \sin \frac{\pi r}{r_g} \right), \quad r \leq r_g.$$

При $r = r_g$ $M(r_g) = \frac{3c^2}{4k} r_g$. В области $r > r_g$

$$M(r) = \frac{3c^2}{2k} \left(r - \frac{1}{2} r_g \right), \quad r > r_g. \quad (28)$$

Энергия E одной частицы в конденсате (16) меньше энергии покоя той же частицы в вакууме. Структура статического состояния гравитирующих бозонов в конденсате отличается от невзаимодействующих частиц в вакууме. В модели $\lambda\psi^4$ упругие столкновения частиц происходят без диссипации. В этой модели видно, что треть полной энергии расходуется на создание связанного состояния бозонов. Вторая треть обеспечивает баланс плотности и

упругости. И только одна треть исходной массы покоя остается источником гравитационного поля вне конденсата. Если граница конденсата $r_h \gg r_g$, то полная масса черной дыры (28) вдвое превосходит формулу Шварцшильда $M = \frac{c^2}{2k} r_h$. Таков энергетический расклад гравитационного дефекта массы черной дыры в модели $\lambda\psi^4$.

3. ТЕМНАЯ МАТЕРИЯ В СИНХРОННЫХ КООРДИНАТАХ

Сфера $r = r_h$ это граница, разделяющая черную дыру и темную материю. Проявления темного сектора (например, плато на кривых вращения галактик [23]) адекватно описываются с помощью продольного векторного поля ϕ_i [29]. Лагранжианом поля ϕ_i является

$$L = (\phi_{;m}^m)^2 - V(\phi^n \phi_n). \quad (29)$$

Для гравитирующих, но не взаимодействующих друг с другом объектов темного сектора потенциал

$$V(\phi^n \phi_n) = V_0 + V_0' \phi^n \phi_n, \quad V_0' = \frac{dV(x)}{dx} \text{ при } x = 0.$$

В уравнениях Эйнштейна V_0 является простой добавкой к космологической постоянной (формула (62) в [29]). Это проявляется в однородном расширении Вселенной в масштабах, много больших чем расстояния между галактиками. В масштабе черной дыры расширение Вселенной ничтожно. Поэтому тензор энергии-импульса темной материи

$$T_i^k = \delta_i^k \left((\phi_{;m}^m)^2 - V_0' \phi^m \phi_m \right) + 2V_0' \phi^k \phi_i. \quad (30)$$

В отличие от (3)

$$V_0' = -\left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)^2 = -\lambda^{-2},$$

где λ — длина волны де-Бройля квантов темной материи. Масса покоя кванта темной материи μ на много порядков меньше массы покоя бозонов m . Вне черной дыры правая часть уравнений Эйнштейна (13), в соответствии с (30), имеет вид

$$T_i^k - \frac{1}{2} T \delta_i^k = \begin{cases} -(\phi_{;m}^m)^2 - V_0'(\phi^r)^2, & i = r, \\ -(\phi_{;m}^m)^2, & i \neq r. \end{cases} \quad (31)$$

С тензором Риччи (11) и тензором (31) уравнения Эйнштейна вне черной дыры $r > r_h$ сводятся к

$$R_0^0: \quad \phi_{;m}^m = (\phi^r)' + 2F_2' \phi^r = 0, \quad (32)$$

$$R_1^1: \quad F_2'^2 + F_2'' = -\kappa V_0'(\phi^r)^2, \quad (33)$$

$$R_2^2: \quad 2F_2'^2 + F_2'' - e^{-2F_2} = 0. \quad (34)$$

Из уравнения (32) получаем

$$\phi^r(r) = C e^{-2F_2(r)},$$

где C — константа интегрирования. Исключая из (33) и (34) F_2'' , приходим к уравнению

$$F_2'^2 = e^{-2F_2} + \kappa V_0' C^2 e^{-4F_2}.$$

Умножением на e^{4F_2} приводим это уравнение к виду

$$\frac{1}{4} \left(\frac{de^{2F_2}}{dr} \right)^2 = e^{2F_2} + \kappa V_0' C^2$$

и определяем метрическую компоненту $g_{22}(r)$ в синхронной системе отсчета:

$$g_{22}(r) = -e^{2F_2} = \kappa V_0' C^2 - (r + D)^2, \quad r > r_h. \quad (35)$$

От лагранжиана темной материи (29) требуется, чтобы константа V_0' была отрицательной. Заметим, что $V_0' < 0$ является также условием регулярности в центре (формула (39) в [29]). Две константы интегрирования $C^2 = -(\kappa^2 |p| V_0')^{-1}$ и $D = -r_h$ в (35) обеспечивают плавный переход гравитационного поля через границу черной дыры и темной материи:

$$g_{22}(r) = \begin{cases} -\frac{1}{\kappa|p|} \sin^2 \left(\sqrt{\kappa|p|} r \right), & r < r_g, \\ -\frac{1}{\kappa|p|}, & r_g < r < r_h, \\ -\frac{1}{\kappa|p|} - (r - r_h)^2, & r > r_h. \end{cases} \quad (36)$$

Связь (25) позволяет выразить $g_{22}(r)$ через гравитационные радиусы r_g и r_h :

$$g_{22}(r) = \begin{cases} -\frac{4}{\pi^2} r_g^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{r}{r_g} \right), & r < r_g, \\ -\frac{4}{\pi^2} r_g^2, & r_g < r < r_h, \\ -\frac{4}{\pi^2} r_g^2 - (r - r_h)^2, & r > r_h. \end{cases} \quad (37)$$

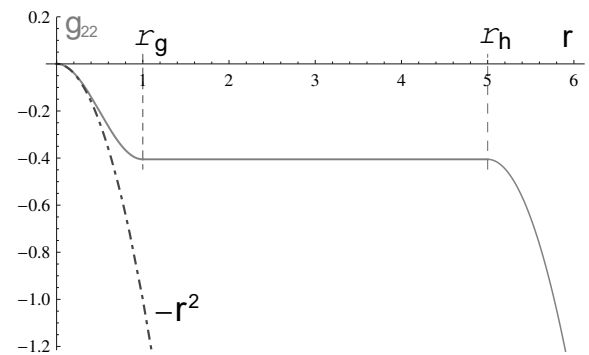


Рис. 1. Компонента метрического тензора $g_{22}(r)$ в синхронной системе координат (37) (сплошная красная линия). Параметры $r_g = 1$ и $r_h = 5$ выбраны для наглядности. В реальности r_h на много порядков больше r_g . Пунктирная линия — это $g_{22}(r) = -r^2$ в координатах Шварцшильда (2)

На рисунке приведена компонента метрического тензора $g_{22}(r)$ (37) в синхронной системе координат (для ясности показано красной сплошной линией). Параметры $r_g = 1$ и $r_h = 5$ выбраны для наглядности. В действительности гравитационные радиусы черных дыр r_h и r_g один больше другого на много порядков.

Волновая функция темной материи

$$\phi^r(r) = \frac{2}{\pi} \frac{\lambda r_g}{\kappa} \left[\left(\frac{2r_g}{\pi} \right)^2 + (r - r_h)^2 \right]^{-1}, \quad r \geq r_h$$

быстро убывает с расстоянием от черной дыры.

Исторически название радиуса поверхности черной дыры r_h горизонтом событий связано с тем, что в координатах Шварцшильда компонента метрического тензора $g^{rr}(r_h) = 0$. Тот факт, что g^{rr} обращается в нуль на тех же радиусах r_g и r_h , (с граничными условиями на которых решения уравнений не единственные), является исключительно свойством метрики Шварцшильда. В синхронных координатах g^{rr} на этих гравитационных радиусах остается конечным. Я не вижу оснований считать, что для удаленного наблюдателя интерфейс черной дыры и темной материи r_h является горизонтом событий.

Глобальный проект сети телескопов под названием The Event Horizon Telescope (Телескоп горизонта событий) фактически нацелен на исследование области границы раздела черной дыры и темной материи. Привлекает внимание возможность увидеть не только фасад, но и обратную сторону черной дыры особым путем гравитационного линзирования (см. [30] и приведенные там ссылки). Регулярное статическое решение для черной дыры с массой сильно больше массы Солнца найдено только при наличии границы с темной материей, а не в вакууме [24]. На мой взгляд, при гравитационном линзировании черной дыры удобно исходить из статической синхронной метрики с компонентой $g_{22}(r)$ (37):

$$ds^2 = (dx^0)^2 - dr^2 - \left(\frac{4}{\pi^2} r_g^2 + (r - r_h)^2 \right) \times \\ \times (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad r > r_h. \quad (38)$$

Вопрос о движении материи в метрике (38) выходит за рамки этой статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. Schwarzschild, *Über das Gravitationsfeld eines Massenpunktes nach der Einsteinschen Theorie*; Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Academie der Wissenschaften: Berlin, Germany, 1916; pp. 189–196.
2. Einstein, A. *Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie*. Ann. Phys. 1916, 49, 769–822.
3. M. D. Kruskal, Phys. Rev. **119**, 1743 (1960).
4. G. Szekers, Publ. Mat. Debrecen **7**, 285 (1960).
5. I. D. Novikov, *On the Evolution of a Semiclosed World*, Doctoral dissertation, Sternberg Astronomical Institute, Moscow (1963).
6. S. Chandrasekhar, Astrophys. J. **74**, 81 (1931).
7. L. D. Landau, Phys. Zs. Sowjet. **1**, 285 (1932).
8. J. R. Oppenheimer and G. Volkoff, Phys. Rev. **55**, 374 (1939).
9. J. R. Oppenheimer and H. Snyder, Phys. Rev. **56**, 455 (1939).
10. S. Gillessen, F. Eisenhauer, S. Trippe, T. Alexander, R. Genzel, F. Martins, and T. Ott, Astrophys. J. **692**, 1075 (2009).
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика. Часть 1*, Москва, Наука-физматлит (1995).
12. https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_Model.
13. L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
14. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика. Часть 2*, Москва, Физматлит (2000).
15. G. Baym, T. Hatsuda, T. Kojo, P. D. Powell, Y. Song, and T. Takatsuka, arXiv:1707.04966v1 (2018).
16. M. Colpi, S.L. Shapiro, and I. Wasserman, Phys. Rev. Lett. **57**, 2485 (1986).
17. R. Friedberg, T. D. Lee, and Y. Pang, Phys. Rev. D **35**, 3640 (1987).
18. D. J. Kaup, Phys. Rev. **172**, 1331 (1968).
19. D. F. Torres, S. Capozziello, and G. Lambiase, Phys. Rev. D **62**, 104012 (2000).
20. Б. Э. Мейерович, ЖЭТФ **154**, 1000 (2018).
21. B. E. Meierovich, Universe **5**, 198 (2019).
22. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973).

- 23.** В. Е. Meierovich, Phys. Rev. D Part. Fields Gravit. Cosmol. **87**, 103510 (2013).
- 24.** В. Е. Meierovich, Universe **6**, 113 (2020).
- 25.** В. Е. Meierovich, J. Phys.:Conf. Ser. **2081**, 012026 (2021).
- 26.** А. S. Eddington, Nature **113**, 192 (1924).
- 27.** G. Lemaitre, Ann.Soc.Sci. Bruxelles I. **A53**, 51 (1933).
- 28.** Л. С. Понтрягин, *Обыкновенные дифференциальные уравнения*, Физматлит, Москва (1961).
- 29.** В. Е. Meierovich, J.of Gravity **2014**, 568958 (2014).
- 30.** В.И. Докучаев, Н. О. Назарова, ЖЭТФ, **155**, 677 (2019).

ТЕРАГЕРЦЕВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ С ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ (THz–TDS) СВЕТОДИОДНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ТРЕМЯ И ПЯТЬЮ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Е. Р. Бурмистров*, Л. П. Авакянц**

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
119234, Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 ноября 2022 г.,
после переработки 17 декабря 2022 г.
Принята к публикации 21 декабря 2022 г.

Методом терагерцевой спектроскопии с временным разрешением (THz–TDS) зарегистрированы резонансные частоты плазмонных осцилляций, возбуждаемые в гетероструктурах со множественными квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ лазерными импульсами длительностью 130 фс в диапазоне температур от 90 до 170 К. Быстрое преобразование Фурье временных форм терагерцевых импульсов позволило получить частотные спектры мощности и фазового сдвига терагерцевого излучения, интерпретация которых дала возможность оценить время релаксации квазиимпульса ($\tau = 10^{-12}$ с), подвижность ($\mu = 4 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$) и эффективную массу ($m^* = 0.45m$) основных носителей заряда в исследованных гетероструктурах. На основании частотных спектров мощности и фазового сдвига терагерцевого излучения были получены температурные зависимости эффективной массы и времени релаксации квазиимпульса двумерного электронного газа (2DEG). Значение подвижности 2DEG, полученное методом THz–TDS, хорошо согласуется с данными холловских измерений.

DOI: 10.31857/S0044451023050061
EDN: BDSFKN

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод терагерцевой спектроскопии с временным разрешением (THz–TDS) основан на генерации терагерцевых импульсов и детектировании их временных форм световыми импульсами фемтосекундной длительности [1]. Непосредственное измерение временных форм терагерцевых импульсов позволяет извлекать информацию о фазовом сдвиге терагерцевого излучения, что, в свою очередь, открывает возможности для исследований механизмов релаксации с участием носителей заряда.

Метод THz–TDS показал эффективность при изучении систем в условиях низких (5–10 К) температур и с низкой (10^{11} – 10^{13} см^{-3}) электронной плотностью, таких, например, как плазма разряда He [2, 3]. В работах [4, 5] метод THz–TDS исполь-

зовался для исследований проводимости, подвижности и плотности носителей заряда в поликристаллах CuInSe_2 и в полупроводниковых соединениях $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ при $T = 7 \text{ К}$. В сочетании с теорией функционала плотности метод THz–TDS применялся для изучения проводящих свойств топологических изоляторов и сверхпроводников [6]. Таким образом, возможности THz–TDS дополняют широко используемые методы ИК-спектроскопии, комбинационного рассеяния и расширяют исследуемый диапазон частот.

При генерации терагерцевого излучения в гетероструктурах со множественными квантовыми ямами (МКЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ одновременно с фотолюминесценцией авторами работы [7, 8] установлена зависимость между выходной мощностью терагерцевого излучения и числом КЯ в активной области. Согласно представленным в [7, 8] результатам увеличение числа КЯ и концентрации In приводит к усилению выходной мощности терагерцевого излучения. В сочетании с фотовозбуждением метод THz–TDS использовался для определения типа

* E-mail: eugeni.conovaloff@yandex.ru

** E-mail: avakyants@physics.msu.ru

проводимости, диффузионной длины электронов и дырок и динамики излучательной рекомбинации в гетероструктурах [9–11].

В работе [12] исследовалось взаимодействие терагерцевого излучения с гетероструктурами AlGaN/GaN. Показано, что при поглощении терагерцевых импульсов в гетероструктурах AlGaN/GaN возникают двумерные (2D) плазмонные осцилляции с характерными резонансными частотами в диапазоне 0.5–3.5 ТГц. При регистрации временных форм терагерцевых импульсов методом THz-TDs в диапазоне температур 80–300 К было обнаружено красное смещение плазмонной резонансной частоты. Авторы связывают наблюдаемый эффект с температурной перенормировкой эффективной массы основных носителей заряда в одиночной КЯ AlGaN/GaN [13].

В данной работе в качестве источников терагерцевого излучения используются гетероструктуры InGaN/AlGaN/GaN со встроенными пьезоэлектрическими полями, напряженность которых может достигать 3 МВ/см [8, 14]. Гетероструктуры со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ преобразуют фемтосекундные оптические импульсы в терагерцевые электромагнитные волны [15].

Исследования проводящих свойств гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN являются актуальными в связи с их широким практическим использованием [16, 17]. Например, УФ-светодиоды на основе гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN обладают 40-процентной эффективностью излучения [18–20]. Однако выходная мощность и эффективность излучения приборов микро- и оптоэлектроники на основе гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN определяются подвижностью двумерного электронного газа (2DEG) во МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

Целью данной работы является определение методом THz-TDs времени релаксации квазиимпульса, подвижности и эффективной массы основных носителей заряда в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, широко используемых в настоящее время в светодиодах синего и зеленого диапазонов излучения.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОБРАЗЦЫ ГЕТЕРОСТРУКТУР InGaN/AlGaN/GaN

Объектом исследования является типичная для светодиодных гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области слоевая структура (рис. 1). Исследовались промышленные образцы гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN, выращенные методом газовой фазной эпитаксии (ГФЭ).

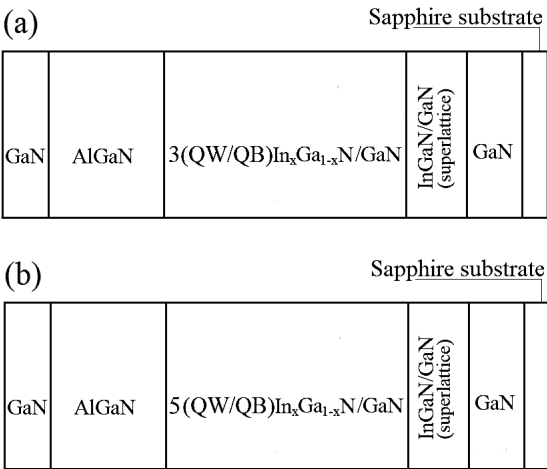


Рис. 1. Слоевая структура образцов с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области

Для гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN на подложке Al_2O_3 площадью 0.4 мм² и толщиной 430 мкм в направлении [0001] первым наращивался затравочный низкотемпературный слой GaN толщиной 5 мкм, предназначенный для уменьшения рассогласования постоянных кристаллических решеток между формируемыми слоями. Для улучшения структурного качества полупроводника и снижения плотности дислокаций в слоях гетероструктуры формировалась буферная сглаживающая сверхрешетка InGaN/GaN (20 периодов квантовая яма/квантовый барьер (КЯ/КБ) с толщинами 2/2 нм). Активная область гетероструктур состоит из трех и пяти КЯ/КБ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с толщинами 2.5/15 нм и 3/12 нм. Далее формировался слой AlGaN толщиной 20 нм и слой GaN толщиной 110 нм. Ширина запрещенной зоны и мольная доля индия определялись с помощью методики фототоковой спектроскопии, как это описывается в работе [21]. Основные параметры исследуемых образцов представлены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры образцов гетероструктур InGaN/AlGaN/GaN

<i>N</i>	КЯ/КБ, нм	<i>S</i> , мм ²	<i>x</i> _{In}	<i>E_g</i> , эВ
3	2.5/15	0.4	0.22	2.6
5	3/12	0.4	0.24	2.6

В таблице 1 приняты обозначения: *N* — число КЯ, *S* — площадь поверхности кристалла, *E_g* — ширина запрещенной зоны $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, *x*_{In} — мольная доля индия.

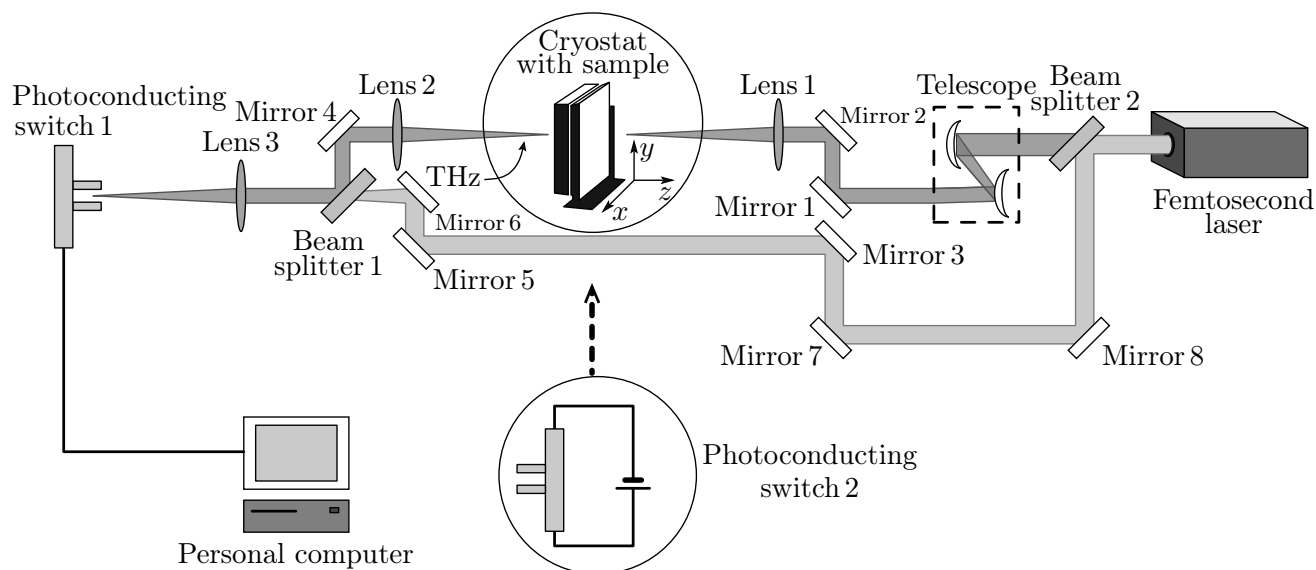


Рис. 2. Схема экспериментальной установки для генерации терагерцевых импульсов и детектирования их временных форм

В серийном производстве готовых светодиодных устройств на основе МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используется рост вдоль полярного направления $[0001]$ гексагонального GaN. В результате пьезоэлектрической и спонтанной поляризации в активной области гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ формируются пьезоэлектрические поля с напряженностью порядка единиц МВ/см. Обычно для оценки напряженности пьезоэлектрических полей исследуется зависимость энергии перехода между основными (невозбужденными) уровнями в КЯ валентной зоны и зоны проводимости от внешнего электрического поля. В основе такого подхода лежит квантово-размерный эффект Штарка (QCSE).

Основываясь на результатах, полученных методом фототоковой спектроскопии (PCS), можно считать, что:

1. распределение встроенных электрических полей в исследуемых гетероструктурах $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ является однородным;
2. деформационными сдвигами в активном слое гетероструктур $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ можно пренебречь. Измеряемая с помощью ячейки Голея мощность выходного терагерцевого излучения для гетероструктур с тремя и пятью КЯ составила 3 мкВт и 8 мкВт. Следовательно, исследуемые образцы соответствуют области прозрачности терагерцевого излучения, а конверсия мощности фемтосекундного импульса в мощность терагерцевого составляет соответственно 0.005% и 0.014%.

3. МЕТОДИКА ГЕНЕРАЦИИ ТЕРАГЕРЦЕВЫХ ИМПУЛЬСОВ И ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ИХ ВРЕМЕННЫХ ФОРМ

В данной работе предложена методика регистрации частотных спектров мощности и фазового сдвига терагерцевого излучения, в основе которой заложен механизм возбуждения плазменных осцилляций в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ оптическими импульсами фемтосекундной длительности. Измерения проводились на установке, схема которой приведена на рис. 2.

В схеме (рис. 2) источником излучения является Ti: сапфировый лазер с временным окном импульсов 130 фс на длине волны 800 нм (ИК-излучение) со средней выходной мощностью 57 мВт и с частотой следования импульсов 60 МГц. Регистрация временных форм терагерцевых импульсов осуществлялась в геометрии на прохождение. Излучение Ti: сапфирового лазера диаметром пучка 1.8 мм с помощью делителя пучка разделялось на пучок накачки и пробный пучок (референс) (рис. 2). Пучок накачки использовался в канале генерации терагерцевых импульсов. Референс использовался в когерентной схеме детектирования для управления детектором, чувствительным к электрическому полю терагерцевых импульсов. Предварительно проводилась юстировка оптического и терагерцевого путей излучения.

В исследованных гетероструктурах $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ уровень Ферми поверхностного состояния отличается от объемного уровня

Ферми. Следовательно, вблизи поверхности граница запрещенной зоны искривляется. В области искривления формируются встроенные электрические поля, которые приводят к перераспределению электронной плотности в глубь полупроводника. Поскольку Ti:сапфировый лазер настроен на длину волны 800 нм, используемый квант света имеет энергию 1.55 эВ. Ширина запрещенной зоны в области КЯ InGaN равна 2.6 эВ. Следовательно, в результате двухфотонного поглощения фемтосекундных лазерных импульсов в КЯ InGaN возникают пространственно разделенные электроны и «дырки». Под действием встроенного пьезоэлектрического поля электрон-дырочная пара становится поляризованной. Это ведет к генерации переменного во времени дипольного момента в системе, который, в свою очередь, приводит к излучению терагерцевых электромагнитных волн.

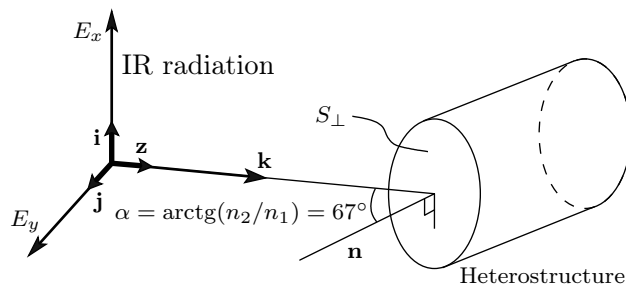


Рис. 3. Схема геометрии эксперимента, где n_1 — показатель преломления среды, из которой ИК-излучение падает на поверхность гетероструктуры, n_2 — показатель преломления GaN, α — угол Брюстера для гетероструктуры InGaN/AlGaIn/GaN, k — волновой вектор ИК-излучения, n — нормаль к поверхности, E_x, E_y — компоненты напряженности электрического поля ИК-излучения

Поскольку размер пятна ИК-излучения на поверхности гетероструктуры больше длины волны ИК-излучения, необходимо учитывать интерференцию от элементарных источников в поперечном сечении пятна, приводящую к модуляции результирующей диаграммы. Максимальная мощность генерации терагерцевого излучения наблюдается в том случае, если колебания элементарных источников складываются в фазе вдоль направления излучения элементарного диполя, т. е. вдоль касательной к поверхности гетероструктуры. Поэтому пучок накачки с P -поляризацией электрического поля падал под углом Брюстера на поверхность гетероструктуры (рис. 3). При падении под углом Брюстера ИК-излучение с P -поляризацией электрического поля проходит максимально эффективно через образец без отражения. На выходе из образца расходящееся те-

рагерцевое излучение фокусировалось кремниевой линзой 2, зеркалом 4 и направлялось в детектор.

Чтобы отделить дипольный отклик 2DEG от колебаний различной физической природы, возникающих в результате генерации терагерцевого излучения, проводилось временное стробирование терагерцевых импульсов. В целях селективного выделения их временных участков и регистрации временной зависимости их электрического поля использовались временные окна (или стробы). Чем больше временное окно, тем более высокие частоты можно детектировать.

Путем регулирования времени задержки между референсом и импульсом накачки была подобрана ширина временного окна [22]. Во временном окне регистрировались импульсы, соответствующие дипольному отклику 2DEG и подавлялись остальные импульсы. При использовании временных окон импульсный отклик среды умножался на функцию окна. В частотной области это соответствует свертке функции импульсного отклика на спектр окна.

Терагерцевый и оптические импульсы (импульс накачки и референс) являются репликами одного и того же фемтосекундного импульса. Следовательно, терагерцевый импульс и референс связаны друг с другом по фазе и эта связь остается постоянной во времени. Длительность импульса накачки (130 фс) меньше периода терагерцевого импульса. Поэтому референс взаимодействует на детекторе с одним и тем же временным участком терагерцевого импульса.

Стробирование детектора во временной области осуществлялось с помощью оптической системы задержки, состоящей из зеркал 7, 8 с регулируемым расстоянием между ними. За счет изменения расстояния между зеркалами 7 и 8 регулировалось время прихода референса на детектор относительно терагерцевого импульса. Это позволило детектировать разные участки терагерцевого импульса с временным разрешением, равным длительности референса. Шаг перемещения составил 17 фс (5 мкм).

Терагерцевые импульсы детектировались с помощью фотопроводящей антенны (ФП1), состоящей из двух металлических электродов, расположенных на полупроводниковой изолирующей подложке с рабочей поверхностью $30 \times 40 \text{ мкм}^2$ из низкотемпературного GaAs толщиной 3 мкм, и выращенной методом ГФЭ при температуре 3000 °С. Электроды ФП1 подключались к измерителю тока. Электрический ток J , пропорциональный амплитуде электрического поля терагерцевых импульсов, создавался фото-

возбужденными носителями заряда, движущимися в электрическом поле

$$J = \langle N \rangle e \mu E(\tau), \quad (1)$$

где $\langle N \rangle$ — среднее значение концентрации фотовозбужденных носителей, τ — регулируемое время задержки референса относительно импульса накачки.

В настоящей работе регистрировались две временные формы электрического поля терагерцевых импульсов $E_{on}(t)$ и $E_{off}(t)$. Временные формы $E_{on}(t)$ детектировались с помощью референса, время прихода которого регулировалось оптической системой задержки (рис. 2). Для регистрации временной зависимости $E_{off}(t)$ использовались две фотопроводящие антенны. Одна из них (ФП1) применялась в качестве детектора терагерцевых импульсов. Другая (ФП2) использовалась вместо криостата с образцами для преобразования подаваемых на нее фемтосекундных импульсов в терагерцевые (рис. 2). Electroды ФП2 были подключены к источнику питания. Сгенерированные на ФП2 терагерцевые импульсы поступали на ФП1. Путем обработки соответствующих временных форм методом быстрого преобразования Фурье (БПФ) осуществлялся переход из временного представления в частотное. Визуализация терагерцевых спектров эмиссии и их обработка проводились с помощью персонального компьютера.

4. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Пусть временная зависимость электрического поля фемтосекундного ИК-импульса длительностью τ описывается функцией $E_{opt}(t)$, а его интенсивность функцией $I_{opt}(t)$ (рис. 4).

Пусть функция $G(t)$ характеризует фазовую модуляцию фемтосекундного ИК-импульса вследствие его прохождения через образец толщиной h . Тогда сигнал на детекторе $N(t')$ можно представить в виде свертки двух функций, одна из которых, $K_{THz}(t)$, соответствует электрическому полю терагерцевых импульсов:

$$N(t') = I_{opt}(t) \otimes K_{THz}(t'). \quad (2)$$

Учесть фазовую модуляцию, вызванную временной задержкой терагерцевого импульса в образце, можно, интегрально связав $K_{THz}(t)$ с функцией электрического поля ИК-излучения

$$K_{THz}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t-t') E_{opt}(t') dt'. \quad (3)$$

Осуществить переход из временного представления в частотное можно с помощью БПФ. В данном слу-

чае свертка функций представляется в виде произведения фурье-образов

$$K_{THz}(\omega) = G(\omega) E_{opt}(\omega). \quad (4)$$

В уравнении (4) $G(\omega)$ является комплексно значащей функцией передачи модуляции. Физический смысл модуляции монохроматического излучения имеет $\text{Re}[G(\omega)]$.

В методе THz-TDs результирующий спектр является наложением фурье-образов терагерцевого импульса и референса:

$$G(\omega) = \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} K_{THz}(t) \exp(-i\omega t) dt}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} E_{opt}(t) \exp(-i\omega t) dt} = \frac{K_{THz}(\omega)}{E_{opt}(\omega)}. \quad (5)$$

Сдвиг во времени двух терагерцевых импульсов друг относительно друга на величину Δt за счет конечного времени релаксации 2DEG во МКЯ приводит к сдвигу фазы одного из них, который можно учесть следующим образом:

$$K_{THz}(\omega) \exp(-i\omega \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K_{THz}(t - \Delta t) \times \exp(-i\omega t) dt. \quad (6)$$

Как уже говорилось, длительность оптического импульса меньше терагерцевого. Следовательно, функцию $I_{opt}(t)$ можно аппроксимировать с помощью дельта-функции $\delta(t)$. Уравнение (2) приобретает вид

$$N(t') = I_{opt}(t) \otimes K_{THz}(t') \approx \delta(t) \otimes K_{THz}(t') = K_{THz}(t'). \quad (7)$$

Последнее означает, что регистрировать временную форму терагерцевого импульса можно только тогда, когда он одновременно взаимодействует с референсом на детекторе. Следовательно, методом THz-TDs можно регистрировать фазовый сдвиг, мощность и электрическое поле терагерцевых импульсов как функции времени.

Переход из временного представления временных форм терагерцевых импульсов в частотное осуществлялся с применением аппарата БПФ. Это дало возможность разложить временные формы терагерцевых импульсов на отдельные фурье-гармоники [22]:

$$E_{off, on}(f) = |E_{off, on}(f)| \exp(i\phi_{off, on}(f)). \quad (8)$$

БПФ временной зависимости $E_{on}(t)$ позволило выявить минимумы, соответствующие резонансным частотам 2D-плазменных осцилляций.

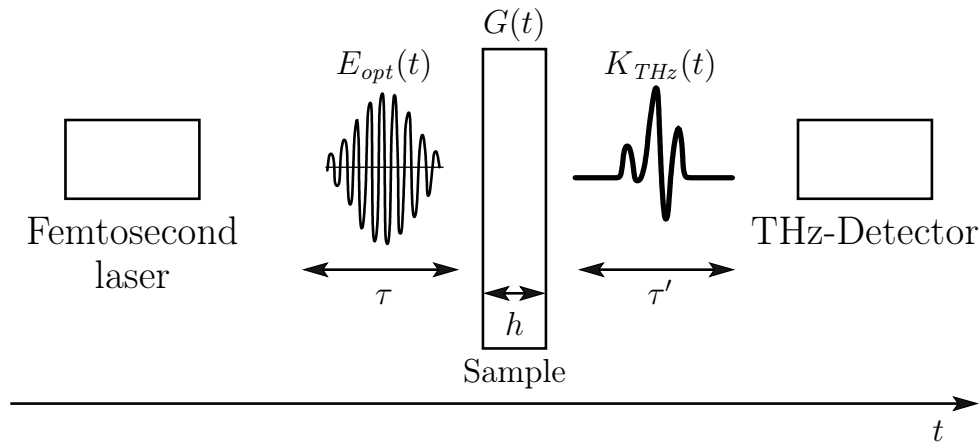


Рис. 4. Схема, поясняющая механизм образования 2D-плазмонных осцилляций, возбуждаемых в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Показана временная шкала, указывающая направление распространения оптического и терагерцевого импульсов

Для характеристики терагерцевых спектров эмиссии оценивались такие параметры, как спектральная мощность $P_i(f) = |E_{on}(f)|^2 / |E_{off}(f)|^2$ и фазовый сдвиг $\Phi_i(f) = \phi_{on}(f) - \phi_{off}(f)$. Методом разворачивания фазы определялась полная фаза $\Phi_i(f)$, соответствующая числу периодов, укладываемых в пределах разности хода длин волн падающего и прошедшего через криостат с образцом излучения. Для этого к каждому значению фазы в пределах первого периода прибавлялся множитель 2π . Заранее учитывалось, что скачки фазы отсутствуют в точках перехода через период. Значение разности хода длин волн было установлено в ходе эксперимента.

Для моделирования частотной зависимости $E_{on}(f)$ проводилось разложение в ряд Фурье с вычисленными по формуле (8) фурье-компонентами частотной зависимости $E_{off}(f)$ и с комплексной функцией передачи $F(f)$

$$E_{sim}(f) = F(0)E_{off}(0) + \sum_k F(f_k)E_{off}(f_k) \times \exp(2\pi i f_k t), \quad (9)$$

где $F(f_k)$ была найдена путем решения уравнений Максвелла в гидродинамической модели высокочастотных свойств 2DEG как отклик среды на плоскую волну с частотой f , $f_k = k/\Delta t$, $k = 1, 2, \dots$ и Δt — временное окно ИК-импульсов. Функция $F(f_k)$ зависит от диэлектрического окружения 2DEG. В процессе нахождения $F(f_k)$ барьерный слой GaN и подложка Al_2O_3 моделировались как два разных слоя с комплексными диэлектрическими проницаемостями ϵ_d и ϵ_s . В выражениях для ϵ_d и ϵ_s учитывались компоненты $\text{Im}[\epsilon_d]$ и $\text{Im}[\epsilon_s]$, которые отвечают за потери

энергии в плоскопараллельных слоях гетероструктуры.

Для рассматриваемых плазмонных структур резонансные частоты оценивались из закона дисперсии стролируемых 2D-плазмонов [23, 24]

$$f_{g,n} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{4\pi e^2 N_{2DEG} |\mathbf{q}_n|}{m^* \epsilon_0 (\epsilon_s + \epsilon_d \cdot \text{cth}(d_{2DEG} |\mathbf{q}_n|))}}, \quad (10)$$

где $|\mathbf{q}_n| = 2\pi n/P$, $n = 1, 2, \dots, P$ — период активной области ($P = 17.5 \text{ нм}$ и $P = 15 \text{ нм}$ в случае гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$), $\epsilon_s = 10.6 + i\alpha$ — диэлектрическая проницаемость подложки, $\epsilon_d = 9.5 + i\beta$ — диэлектрическая проницаемость барьера, m^* — эффективная масса, определяемая с помощью формулы (10), ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, d_{2DEG} — глубина залегания 2DEG (для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $d_{2DEG} = 36 \text{ нм}$ и $d_{2DEG} = 28 \text{ нм}$). В мнимых частях комплексных диэлектрических проницаемостей введены подгоночные параметры $\alpha = 2000$, $\beta = 1300$, которые позволили учесть радиационные потери в подложке и в области барьеров активного слоя гетероструктур. Значения подгоночных параметров подбирались в целях наилучшего соответствия смоделированного сигнала $E_{sim}(t)$ с данными измерений в процессе нахождения функции $F(f_k)$. Для спектрального диапазона, лежащего ниже частоты первого плазмонного резонанса $f < f_{g,1}$, учитывалось, что ϵ_s и ϵ_d являются бездисперсионными с постоянными значениями соответственно 10.6 и 9.5.

Подстановка в формулу (10) значений резонансных частот позволила оценить эффективную массу m^* основных носителей заряда. На основании значений времени релаксации квазиимпульса τ

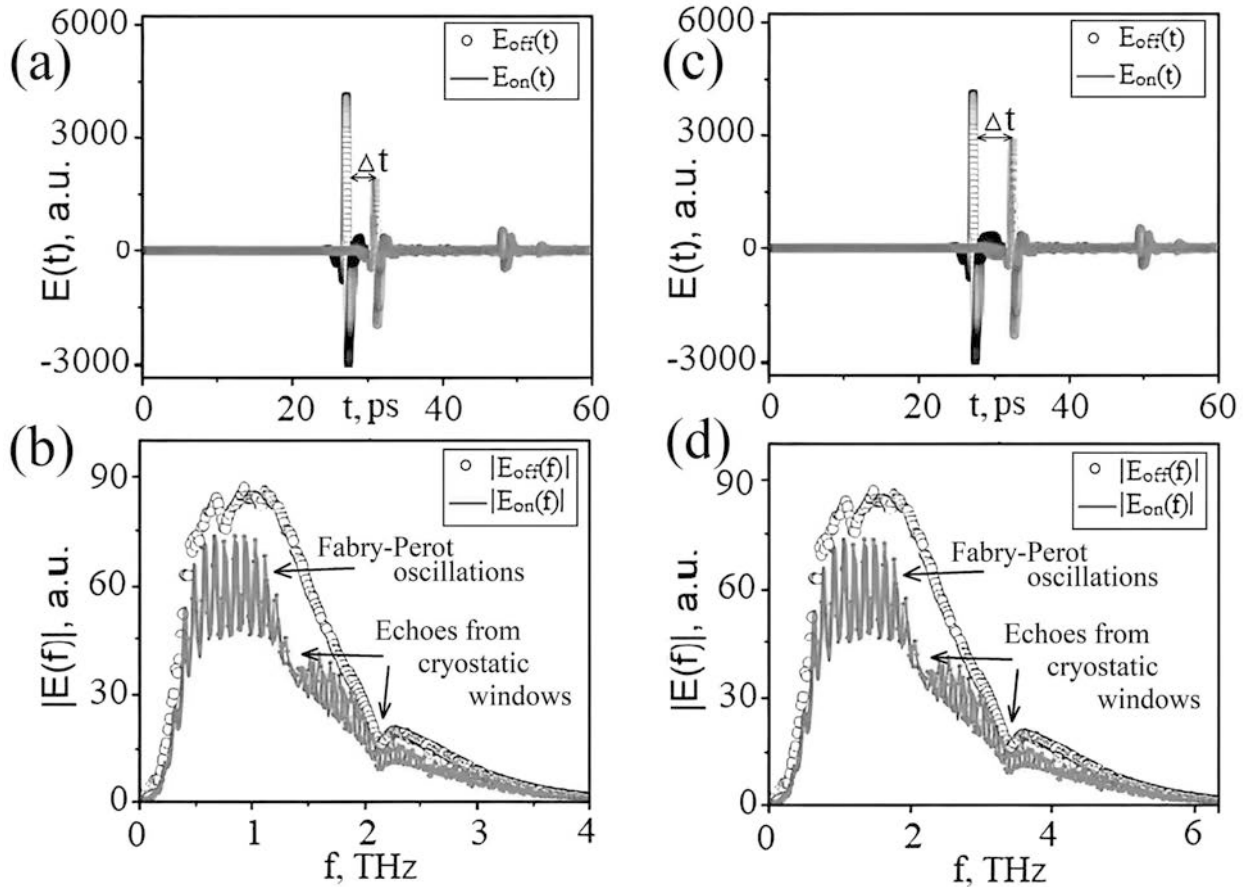


Рис. 5. *a, c*) Временные формы электрического поля терагерцевых импульсов для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. *b, d*) Результат обработки соответствующих временных форм методом быстрого Фурье преобразования

и эффективной массы m^* определялась подвижность 2DEG во МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ по формуле $\mu = e\tau/m^*$.

Для исследуемых гетероструктур холловская подвижность и концентрация определялись в геометрии Ван дер Пау. Регистрация температурных зависимостей холловской концентрации и подвижности осуществлялась на установке «ЕсориаHMS-3000» в магнитных полях до 6 Тл в темноте в интервале от 5 до 300 К.

5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 5 *a, c* представлены временные формы электрического поля терагерцевых импульсов, полученные для двух типов образцов гетероструктур при температуре 90 К.

Свободные носители заряда, генерируемые фемтосекундными импульсами между электродами ФП2, ускорялись приложенным к зазору электрическим полем. В результате возникал импульс тока, который является источником терагерцевого

излучения. Его временная форма $E_{off}(t)$ регистрировалась в соответствии со схемой, изображенной на рис. 2. Временные формы $E_{off}(t)$ терагерцевых импульсов, генерируемых ФП2, сразу детектировались с помощью ФП1. Поэтому их временная форма не менялась в ходе эксперимента (рис. 5 *a, c*).

Временная форма терагерцевых импульсов $E_{on}(t)$ представляет собой максимум с положительными и отрицательными полуволнами. Максимум временной зависимости $E_{on}(t)$ соответствует дипольному отклику 2DEG как ответ на многофотонное возбуждение оптическими импульсами фемтосекундной длительности. Наложение многократных отражений терагерцевого импульса от границ раздела КБ/КЯ проявилось на рис. 5 *a, c* в виде положительных полуволн. Сдвиг фазы на π вследствие наложений многократных отражений от границ раздела КЯ/КБ можно связать с отрицательными полуволнами (рис. 5 *a, c*). Границы разделов КБ/КЯ и КЯ/КБ отличаются между собой соотношениями показателей преломления сред.

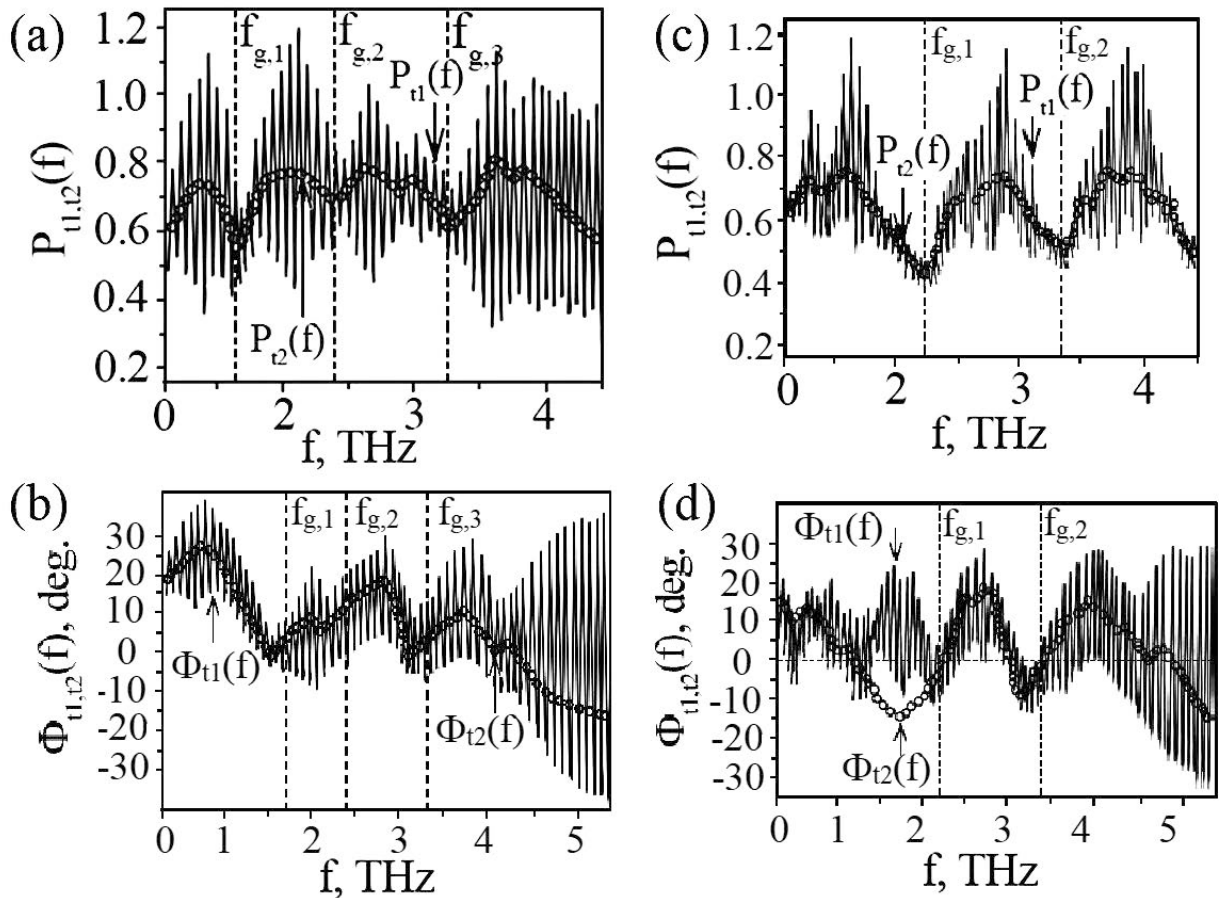


Рис. 6. Спектральная мощность (a, c) и частотные спектры фазового сдвига (b, d) терагерцевого излучения для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

На рис. 5a, c задержка Δt терагерцевого импульса с временной формой $E_{on}(t)$ относительно терагерцевого импульса с временной формой $E_{off}(t)$ обусловлена потерями энергии в слоях гетероструктуры, а также его отражением от подложки Al_2O_3 и от барьеров GaN. Отражения от стенок криостата и от подложки связываются с появлением первого и второго пиков меньшей амплитуды на рис. 5a, c. Величина задержки Δt , равная 2.3 пс (рис. 5a) и 3.4 пс (рис. 5c), является временем релаксации квазиимпульса 2DEG.

На рис. 5b, d представлены частотные зависимости фурье-амплитуд терагерцевых импульсов. В диапазоне от 0.1 до 1.2 ТГц (рис. 5b) и от 0.1 до 2 ТГц (рис. 5d) наблюдаются осцилляции Фабри–Перо, которые мешают наблюдению в этой области 2D-плазменных резонансов. Для определения числа наблюдаемых плазменных мод, а также для регистрации их частот в данной работе получено частотное распределение мощности и фазового сдвига терагерцевого излучения (рис. 6).

Наблюдаются модулированные полосами Фабри–Перо осцилляции функций $P_{t1,t2}(f)$ и $\Phi_{t1,t2}(f)$ в диапазоне частот от 1 до 3.5 ТГц (рис. 6a) и от 2 до 3.5 ТГц (рис. 6c). Эффект «бахромы» на спектрах $P_{t1,t2}(f)$ и $\Phi_{t1,t2}(f)$ возникает вследствие отражения терагерцевого импульса от подложки и его многократной интерференции в плоскопараллельных слоях гетероструктуры $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$. Подавление осцилляций Фабри–Перо на частотных спектрах $P_{t1,t2}(f)$ и $\Phi_{t1,t2}(f)$ достигнуто путем вырезания дорожек сигнала перед первым «эхом» на временной зависимости (рис. 5a, c).

Видно, что фазовый сдвиг вблизи плазменных резонансов (рис. 6b, d) является точкой перегиба функции $\Phi_{t1,t2}(f)$, что соответствует минимумам в частотных спектрах мощности $P_{t1,t2}(f)$. При температурах выше 170 К особенности плазменного резонанса в эксперименте не разрешались.

При температуре 90 К резонансные частоты 2D-плазменных осцилляций для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ равны:

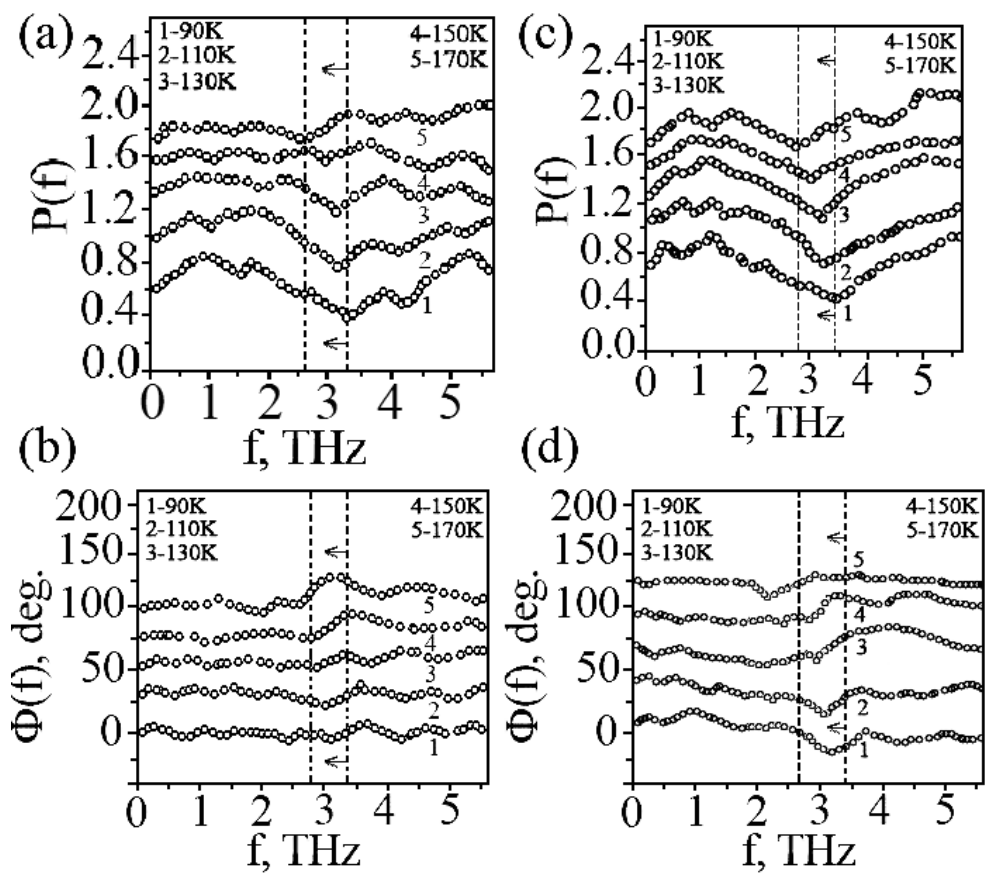


Рис. 7. Спектральная мощность (a,c) и частотные спектры фазового сдвига (b,d) терагерцевого излучения, полученные для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в диапазоне температур от 90 до 170 К с шагом 20 К. Пунктирные вертикальные линии обозначают положение частот плазменных резонансов при температурах 90 К и 170 К. Стрелками обозначено красное смещение 2D-плазмонного резонанса

Таблица 2. Температурная зависимость эффективной массы основных носителей заряда в гетероструктурах с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ по данным частот 2D-плазмонных резонансов

N	T, K				
	90	110	130	150	170
3	0.43m	0.45m	0.45m	0.49m	0.56m
5	0.40m	0.42m	0.42m	0.45m	0.48m

$f_{g,1} = 1.7 \text{ ТГц}, f_{g,2} = 2.4 \text{ ТГц}, f_{g,3} = 3.3 \text{ ТГц}$ и $f_{g,1} = 2.3 \text{ ТГц}, f_{g,2} = 3.4 \text{ ТГц}.$

В настоящей работе получены частотные спектры мощности и фазового сдвига терагерцевых импульсов в диапазоне температур от 90 до 170 К с шагом 20 К (рис. 7).

Увеличение температуры образца приводит к уширению минимума 2D-плазмонного резонанса и к подавлению его пиковой величины (рис. 7a,c). В то же время наблюдается усиление фазовой модуляции. Амплитудный излом увеличивается с 3°

при 90 К до 20° при 170 К (рис. 7b). Наблюдаемое красное смещение 2D-плазмонной резонансной частоты идентифицируется как в спектрах $P(f)$, так и в спектрах $\Phi(f)$. В работах [12, 13] было показано, что красное смещение 2D-плазмонного резонанса связано с температурной перенормировкой эффективной массы основных носителей заряда. Таблица 2 демонстрирует рассчитанные с помощью формулы (10) значения эффективной массы в диапазоне температур от 90 до 170 К.

Столь высокие значения эффективной массы не могут объясняться эффектом гибридизации волновых функций основных носителей заряда или их рассеянием на LO-фононах. Расчет показал, что эффективная масса с учетом гибридизации волновых функций и рассеяния на LO-фононах составляет лишь 52% от значений, полученных при температуре 90 К. Следовательно, данные эффекты недостаточны для обоснования более высоких значений. Непараболичность закона дисперсии также не может быть объяснением, так как холловская концен-

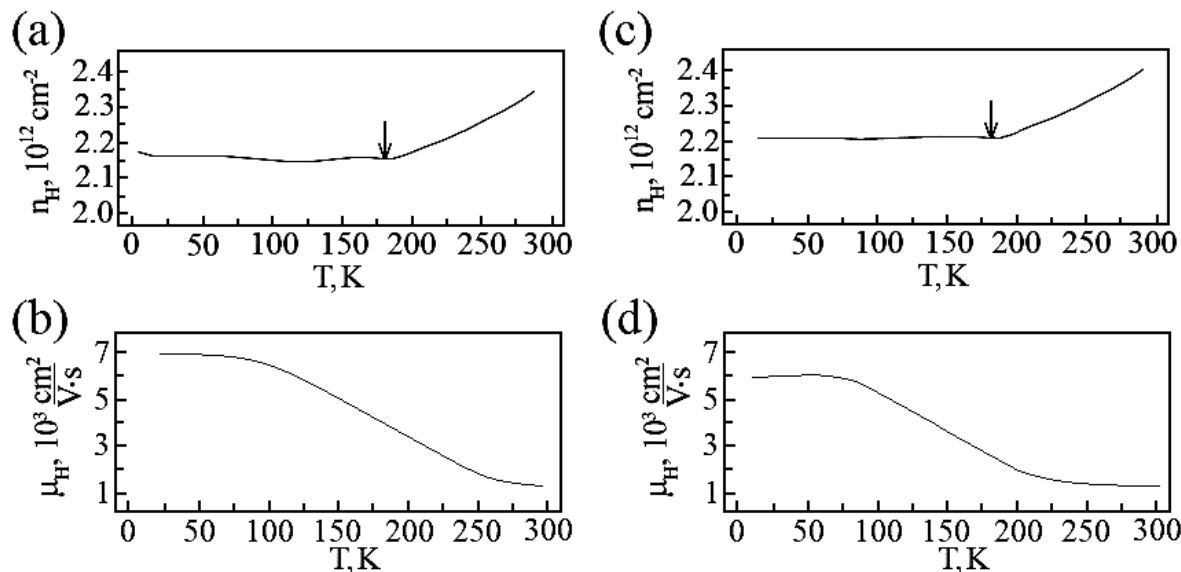


Рис. 8. Температурная зависимость холловской концентрации (a, c) и холловской подвижности (b, d) для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области. Стрелка указывает начало возрастания экспериментальной кривой

трация не изменяется. Поэтому температурная перенормировка эффективной массы со столь большим масштабom, порядка полутора раз, может быть связана с особенностями взаимодействия фемтосекундных ИК-импульсов с 2DEG. Данный вопрос требует дополнительных исследований.

Далее оценивалось полное время затухания плазмонных осцилляций в 2DEG по частотным спектрам мощности терагерцевого излучения на основании соотношения $\tau_{gen} = 1/2\pi\Delta f_{g,n}$ (рис. 6 a, c). Для вычисления полного времени затухания величина $\Delta f_{g,n}$ определялась как полуширина плазмонного резонанса, взятая на половине его высоты [25]. Результаты расчетов полного времени затухания τ_{gen} и времени релаксации квазиимпульса 2DEG представлены в табл. 3.

Таблица 3. Температурная зависимость времени релаксации квазиимпульса 2DEG и времени полного затухания

N	Время затухания	T, K				
		90	110	130	150	170
3	τ , пс	2.3	1.9	1.5	1.3	1.1
	τ_{gen} , пс	1.8	1.6	1.5	1.2	0.8
5	τ , пс	3.4	2.8	2.3	1.7	1.2
	τ_{gen} , пс	2.2	2.0	1.8	1.7	1.4

Из данных табл. 3 видно, что время полного затухания демонстрирует менее слабую температурную зависимость. В области низких температур вре-

мя релаксации квазиимпульса преобладает над временем полного затухания. Данное расхождение при низких температурах может объясняться наличием других форм потери энергии: 1) частичная компенсация встроенного пьезоэлектрического поля; 2) потери на дефектах решетки; 3) возбуждение наклонных плазмонных волн. С ростом температуры время релаксации квазиимпульса уменьшается в связи с электрон-фононным рассеянием. В области более высоких температур значения становятся сопоставимыми.

На основании значений времени релаксации квазиимпульса и эффективной массы рассчитывалась подвижность 2DEG во МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Результаты расчетов приведены в табл. 4.

Таблица 4. Параметры 2DEG по данным частот 2D-плазмонных резонансов при температуре нагрева образца 170 K

N	N_{2DEG} , 10^{12} см^{-2}	$f_{g,2}$, ТГц	τ , пс	$\langle m^* \rangle$	μ , $10^3\text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$
3	2.17	1.5	1.1	$0.56m$	3.5
5	2.20	2.8	1.2	$0.48m$	4.4

Как видно на рис. 8 a, c, ход зависимости холловской концентрации от температуры для гетероструктур со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ является немонотонным. В области низких температур ($30\text{ K} < T < 175\text{ K}$) холловская концентрация сохраняет среднее постоянное значение около $2.17 \cdot 10^{12}\text{ см}^{-2}$ (рис. 8 a) и $2.2 \cdot 10^{12}\text{ см}^{-2}$ (рис. 8 c).

В области более высоких температур ($T > 175$ K) $n_H(T)$ возрастает и достигает значений $2.3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и $2.4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Температурная зависимость $\mu_H(T)$ (рис. 8b,d) типична для гетероструктур InGaN/AlGaIn/GaN. Холловская подвижность уменьшается с ростом температуры в связи с увеличением интенсивности механизма рассеяния на полярных оптических фононах при $T > 85$ K. Значения n_H и μ_H для двух крайних температурных областей представлены в табл. 5.

Таблица 5. Значения холловской подвижности и концентрации в области низких и высоких температур

	30 K		170 K	
N	$n_H, 10^{12} \text{ см}^{-2}$	$\mu_H, 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	$n_H, 10^{12} \text{ см}^{-2}$	$\mu_H, 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$
3	2.17	7.0	2.17	4.2
5	2.20	6.0	2.20	3.0

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Новизна данной работы заключается в том, что гетероструктуры со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используются в качестве источников терагерцевого излучения.

Механизм генерации терагерцевых импульсов заключается в следующем. В результате двухфотонного поглощения оптических импульсов фемтосекундной длительности в КЯ InGaIn генерируются пространственно разделенные электроны и «дырки». Под действием встроенного пьезоэлектрического поля электрон-дырочная пара становится поляризованной. Это ведет к генерации переменного во времени дипольного момента в системе $P(t)$, что, в свою очередь, приводит к излучению терагерцевых электромагнитных волн. Напряженность электрического поля терагерцевых импульсов как функция времени пропорциональна второй производной от дипольного момента $E_{\text{THz}}(t) \sim \partial^2 P(t)/\partial t^2$.

Полярность генерируемых диполей противоположна полярности встроенного пьезоэлектрического поля в гетероструктурах InGaIn/AlGaIn/GaN. Электромагнитное терагерцевое излучение возникает в результате сверхбыстрой динамики электрической поляризации, в ходе которой фотовозбужденные электрон-дырочные пары частично экранируют встроенное поле. Полное его экранирование приводит к уменьшению механических тангенциальных напряжений между слоями InGaIn и GaIn, вызванных рассогласованием постоянных кристаллических ре-

шеток. Это, в свою очередь, ведет к выравниванию потенциального рельефа активной области гетероструктуры (состояние плоских зон). Данный процесс можно рассматривать как «обратный» пьезоэлектрический эффект. Снижение напряженности встроенного пьезоэлектрического поля сопровождается изменением деформации кристаллической решетки.

Регистрация временных форм терагерцевых импульсов методом THz-TDs позволила определить время релаксации квазиимпульса, подвижность и эффективную массу основных носителей заряда в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

Сравнивая полученные результаты, можно утверждать, что увеличение числа КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области гетероструктуры приводит к усилению выходной мощности терагерцевого излучения. Для гетероструктур с тремя и пятью КЯ конверсия мощности фемтосекундного импульса в мощность терагерцевого составляет 0.005% и 0.014%.

В случае гетероструктур с тремя КЯ на частотных спектрах можности наблюдаются три плазмонные резонансные частоты. При добавлении КЯ в активную область наблюдается уменьшение числа плазмонных мод и рост напряженности электрического поля терагерцевых импульсов. Напряженность их электрического поля в пренебрежении временным изменением скорости носителей заряда можно оценить по формуле излучения диполя

$$E_{\text{THz}} \sim \frac{\partial N}{\partial t} e \mu E_{\text{int}} \sin \vartheta, \quad (11)$$

где E_{int} — напряженность встроенного пьезоэлектрического поля в гетероструктуре InGaIn/AlGaIn/GaN; ϑ — угол между нормалью к направлению осцилляций диполя и направлением излучения; $\partial N/\partial t$ — изменение во времени концентрации фотоиндуцированных носителей заряда с подвижностью μ . Максимум терагерцевого излучения направлен вдоль касательной к поверхности гетероструктуры ($\sin \vartheta = 1$), так как колебания элементарных источников складываются в фазе вдоль направления излучения элементарного диполя.

С увеличением числа КЯ в активной области наблюдается уменьшение модуляции фазы вблизи частот плазмонных резонансов. Для гетероструктур с тремя КЯ амплитудный излом составляет 17° , в то время как для гетероструктур с пятью КЯ температурный излом составляет 14° . Установлено, что фазовая модуляция превышает десятки градусов вблизи частот плазмонных резонансов.

Сравнение экспериментальных данных позволило установить отличия и общие закономерности в значениях времени релаксации квазиимпульса, подвижности и эффективной массы основных носителей заряда. Для гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ время релаксации квазиимпульса равно 2.3 пс и 4.3 пс.

С ростом температуры образца от 90 до 170 К наблюдается красное смещение плазмонной резонансной частоты, вызванное перенормировкой эффективной массы основных носителей заряда с довольно большим масштабом. Эффективная масса увеличивается в полтора раза относительно своего первоначального значения при 90 К. Показано, что при температуре 170 К эффективная масса принимает в два раза большие значения по сравнению с полученными авторами работы [12] при тех же температурах.

Исследованные образцы гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ имеют многослойную структуру. Они не легированы донорной или акцепторной примесью. Следовательно, основной вклад в холловскую концентрацию вносит 2DEG. В диапазоне температур от 30 до 170 К значение холловской концентрации постоянное (табл. 5). Следовательно, эффект перенормировки эффективной массы и модуляции фазы связаны не с температурной зависимостью холловской концентрации, а с нелинейной динамикой 2DEG.

Стоит отметить, что исследование времени релаксации 2DEG в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ может дать представление о существующих механизмах рассеяния и о вкладе каждого из них в общий канал релаксации 2DEG.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе с помощью возбуждения 2D-плазмонных осцилляций и регистрации их резонансных частот методом THz-TDs получены значения времени релаксации квазиимпульса, подвижности и эффективной массы основных носителей заряда в трех и в пяти КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Установлено, что 2DEG в трех КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ характеризуется значением времени релаксации квазиимпульса 1.1 пс, подвижностью $3.5 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ и эффективной массой $m^* = 0.56m$ при температуре 170 К. В то же время для гетероструктур с пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ показано, что $\tau = 1.2 \text{ пс}$, $\mu = 4.4 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ и $m^* = 0.48m$.

В данной работе показано осциллирующее поведение мощности выходного терагерцевого излу-

чения с минимумами в диапазоне частот от 1.5 до 3.5 ТГц, что связано с нелинейной динамикой 2DEG во МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

При изучении взаимодействия лазерных импульсов длительностью 130 фс с 2DEG получены частотные зависимости мощности и фазового сдвига терагерцевого излучения. Для обработки терагерцевых спектров эмиссии применялся аппарат быстрого фурье-преобразования. Это дало возможность провести сравнение амплитуд и фаз составляющих фурье-гармоник. Показано, что с увеличением температуры нагрева от 90 до 170 К наблюдается красное смещение плазмонной резонансной частоты, которое связано с температурной перенормировкой эффективной массы основных носителей заряда. В диапазоне температур от 90 до 170 К эффективная масса основных носителей заряда изменяется от $0.43m$ до $0.56m$ (гетероструктуры с тремя КЯ) и от $0.40m$ до $0.48m$ (гетероструктуры с пятью КЯ).

Полученные значения подвижности и времени релаксации квазиимпульса 2DEG в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ могут быть использованы для оптимизации технологических параметров роста композитных гетероструктур и выходной мощности излучения приборов на их основе. Проведенные исследования могут представлять интерес для приложений физики микро- и оптоэлектроники, где желательно иметь максимально возможную подвижность 2DEG с максимально коротким временем жизни.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Richard and M. Schasfoort, *Handbook of Surface Plasmon Resonance*, (2017).
2. A. Ando, T. Kurose, V. Reymond, K. Kitano, H. Kitahara, K. Takano, M. Tani, M. Hangyo, and S. Hamaguchi, *J. Appl. Phys.* **110**, 7 (2011).
3. S. P. Jamison, D. R. Jones, R. C. Issac, B. Ersfeld, D. Clark, and D. A. Jaroszynski, *J. Appl. Phys.* **93**, 7 (2003).
4. C. Strothkämper, A. Bartelt, R. Eichberger, C. Kaufmann, and T. Unold, *Phys. Rev. B* **89**, 11 (2014).
5. A. Mendoza-Galvan and J. Gonzalez-Hernandez, *J. Appl. Phys.* **87**, 760 (2000).
6. M. Orio and D. Pantazis, *F. Neese, Photosynthesis Research* **102**, 2 (2009).

7. G. Sun, R. Chen, and Y. J. Ding, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, **19** (2013).
8. I. Prudaev, S. Sarkisov, O. Tolbanov, and A. Kosobutsky, *Phys. Stat. Sol. B* **252**, 5 (2015).
9. W. Rehman, R. L. Milot, G. E. Eperon, C. Wehrenfennig, J. L. Boland, H. J. Snaith, M. B. Johnston, and L. M. Herz, *Adv. Mat.* **27**, 48 (2015).
10. G. R. Yettapu, D. Talukdar, S. Sarkar, A. Swarnkar, A. Nag, P. Ghosh, and P. Mandal, *Nano Lett.* **16**, 8 (2016).
11. A. M. Ulatowski, L. M. Herz, and M. B. Johnston, *J/ of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves* **41**, 12 (2020).
12. D. Pashnev, V. V. Korotyeyev, J. Jorudas, T. Kaplas, V. Janonis, A. Urbanowicz, and I. Kašalynas, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 16 (2020).
13. K. H. Tsai, T.-M. Wu, and S. F. Tsay, *J. Chem. Phys.* **132**, 034502 (2010).
14. V. V. Korotyeyev, V. A. Kochelap, V. V. Kaliuzhnyi, and A. E. Belyaev, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 252103 (2022).
15. P. J. S. van Capel, D. Turchinovich, H. P. Porte, S. Lahmann, U. Rossow, A. Hangleiter, and J. I. Dijkhuis, *Phys. Rev. B* **84**, (2011).
16. G. Sun, G. Xu, and Y. J. Ding, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **17**, 48 (2011).
17. H. P. Porte, D. Turchinovich, D. G. Cooke, and P. U. Jepsen, *J. Phys.: Conf. Series* **193**, 012084 (2009).
18. М. Л. Бадгутдинов, А. Э. Юнович, *ФТП* **42**, 4 (2008).
19. В. И. Олешко, С. Г. Горина, *Ученые записки физического факультета* **5**, 155501 (2015).
20. В. Г. Мокеров, А. Л. Кузнецов, Ю. В. Федоров, Е. Н. Енюшкина, А. С. Бугаев, А. Ю. Павлов, Д. Л. Гнатюк, А. В. Зуев, Р. Р. Галиев, Е. Н. Овчаренко, Ю. Н. Свешников, А. Ф. Цацульников, В. М. Устинов, *ФТП* **43**, 4 (2009).
21. J. M. Hensley, J. Montoya, M. G. Allen, J. Xu, L. Mahler, A. Tredicucci, H. E. Beere, and D. A. Ritchie, *Optics Express* **22**, 17 (2009).
22. G. Franssen, P. Perlin, and T. Suski, *Phys. Rev. B* **69**, 4 (2004).
23. Z. Chang, *Phys. Rev. A* **70**, 4 (2004).
24. P. Schley, R. Goldhahn, G. Gobsch, M. Feneberg, K. Thonke, and X. Wang, A. Yoshikawa, *Phys. Stat. Sol. B* **246**, 6 (2009).
25. S. J. Allen, D. C. Tsui, and R. A. Logan, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 980 (1977).
26. G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, *Phys. Rev.* **98**, 2 (1955).

ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ И ЭЛЕКТРОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ОТ РАЗМЕРА ГРАНУЛЫ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ

А. С. Старков^а, И. А. Старков^{б}*

^а Университет ИТМО
197101, Санкт-Петербург, Россия

^б Всероссийский научно-исследовательский институт эсиров
191119, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 18 сентября 2022 г.,
после переработки 10 января 2023 г.
Принята к публикации 11 января 2023 г.

Рассматривается задача о нахождении диэлектрической проницаемости и электрокалорического эффекта в модели гранулы сегнетоэлектрической керамики. Предполагается, что гранула состоит из шарообразного сегнетоэлектрического ядра, покрытого диэлектрической оболочкой и помещенного в диэлектрическую матрицу. Толщина переходного слоя считается малой по сравнению с размером гранулы. Зависимость поляризации от электрического поля в ядре задается нелинейным уравнением Гинзбурга–Ландау. Изменение поляризации вызывается изменением внешнего электрического поля, которое на больших расстояниях от гранулы предполагается однородным. Вследствие эффекта электрострикции в трехфазной системе ядро–оболочка–матрица возникает упругое поле, описываемое линейными уравнениями. Для учета влияния доменных стенок на физические характеристики керамики в рассматриваемой модели предлагается использовать подход Киттеля–Мицци–Фуруиши. Предложенная расчетная схема позволяет уточнить зависимость числа доменов от размера шарообразной гранулы. Электрокалорический эффект в грануле представляется в виде суммы первичного и вторичного эффектов, возникающих вследствие упорядочивания дипольных моментов сегнетоэлектрика и из-за наличия деформации и теплового расширения. Исследование проводится для керамики сегнетоэлектрика со структурой перовскита, а в качестве примера рассматривается керамика титаната бария. Для выбранного материала представлены результаты расчетов зависимости диэлектрической проницаемости и отдельных составляющих электрокалорического эффекта от размера гранулы.

DOI: 10.31857/S0044451023050073
EDN: BDXBCC

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди множества эффектов, связывающих электрические и тепловые явления, выделяются термодинамически обратимые эффекты — пирозлектрический и электрокалорический. Пирозлектрический эффект (ПЭЭ) заключается в возникновении пиротока при изменении температуры образца. Электрокалорический эффект (ЭКЭ) является обратным к пирозлектрическому и приводит к изменению тепловых свойств (температуры, энтропии, теплоемкости) образца при подаче или снятии электрического

поля. Интерес к этим явлениям вырос за последние 15 лет в силу потенциальных возможностей использования этих эффектов в новом поколении экологичных высокоэффективных твердотельных генераторов и охладителей [1–3]. К сожалению, разработанные в XXI веке экспериментальные образцы по производительности пока существенно уступают первому охладителю на ЭКЭ, созданному в XX веке [4].

Прогресс в создании твердотельных термопреобразователей энергии во многом сдерживается из-за отсутствия легко получаемых материалов, обладающих высоким ЭКЭ. Одними из возможных кандидатов в такие материалы являются керамические пленки на основе титаната бария BaTiO_3 , более дешевые и простые в изготовлении, чем кристаллы.

* E-mail: ferroelectrics@ya.ru

Максимальное изменение температуры при ЭКЭ для керамики BaTiO_3 достигается вблизи фазовых переходов, где наиболее сильна зависимость диэлектрической проницаемости от температуры. При напряжении 2 МВ/м это изменение составляет 1.3 К [5] вблизи фазового перехода от кубической к тетрагональной фазе и 0.42 К [6] для комнатных температур, где происходит фазовый переход от тетрагональной к орторомбической фазе. Выбор BaTiO_3 в качестве модельного сегнетоэлектрика продиктован также его хорошо изученными свойствами и наличием необходимого количества измеренных материальных параметров.

При теоретическом исследовании зависимости свойств керамики от размера зерен d , как правило, используется свободная энергия Гинзбурга–Ландау–Девоншира (ГЛД), которая задается полиномом от компонент вектора поляризации. Если векторы электрического поля $\mathbf{E}$ и поляризации $\mathbf{P}$ имеют только одну компоненту, то модель ГЛД упрощается до модели Гинзбурга–Ландау (ГЛ). При этом существенным недостатком имеющихся теоретических моделей ЭКЭ в керамике является практически полное игнорирование упругих свойств керамики [7]. Хорошо известно [8, 9], что пьезоэлектрический коэффициент π , который определяет величины ЭКЭ и ПЭЭ, может быть представлен в виде суммы трех слагаемых:

$$\pi = \pi_1 + \pi_2 + \pi_3, \quad (1)$$

которые описывают первичный, вторичный и третичный эффекты соответственно.

Первичный эффект объясняется прямым воздействием электрического поля. При его приложении в изотермическом процессе происходит, как правило, упорядочивание дипольных моментов сегнетоэлектрика, что ведет к уменьшению энтропии. При адиабатическом приложении электрического поля температура увеличивается, так как возрастает средняя энергия диполей.

Третичный эффект появляется при наличии градиента температуры, неоднородной деформации или неоднородности поляризации. К нему относятся флексокалорический эффект (изменение тепловых свойств образца, вызванное градиентом поляризации или деформации [9]) и термополяризационный эффект (появление деформации из-за температурного градиента [10]). Обычно этот эффект весьма мал, и им можно пренебречь по сравнению с первичным и вторичным ЭКЭ.

Вторичный эффект может появляться вследствие магнитоэлектрического эффекта, но наибо-

лее часто он возникает из-за наличия деформации, существующей благодаря пьезоэффекту или эффекту электрострикции. Кроме того, заметный вклад во вторичные эффекты должно вносить тепловое расширение образца. Как показывают оценки [11], вклад упругого вторичного эффекта в полный ЭКЭ составляет 19% для керамики состава $0.68 \text{BaTiO}_3 - 0.32 \text{SrTiO}_3$, обладающей фазовым переходом первого рода. Для сегнетоэлектрических пленок, свойства которых сильно зависят от упругих напряжений [12], вклад вторичного эффекта должен быть больше.

Строго говоря, наличие взаимодействующих полей означает, что калорический эффект в керамике должен рассматриваться как мультикалорический [9]. Ниже за изучаемым эффектом сохраним название ЭКЭ, так как исследуется изменение тепловых свойств сегнетоэлектрика, связанное с изменением электрического поля.

Зависимость ЭКЭ от размера d хоть и изучалась во множестве работ как экспериментально, так и теоретически, но проведенные исследования не позволяют однозначно указать оптимальный размер гранул, при котором ЭКЭ достигает наибольшего значения. Согласно экспериментальным измерениям, максимум ЭКЭ может достигаться как при $d = 10 \text{ мкм}$ [6], так и при $d = 2.5 \text{ мкм}$ [5]. Подобный разброс объясняется вариативностью технологических процессов получения керамики, которая приводит к различающейся микроструктуре и различному распределению зерен по размерам [6]. Для керамик $x \text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3 - (1-x) \text{PbTiO}_3$ при $x = 0.9$ и $x = 0.7$ максимум ЭКЭ достигается при $d = 3.6 \text{ мкм}$ и $d = 2.2 \text{ мкм}$ соответственно [13].

Таким образом, для нахождения оптимального размера гранул можно ограничиться интервалом $0.2 \text{ мкм} < d < 30 \text{ мкм}$. При этом предположении третичный эффект в (1) можно учитывать приближенно ($\pi_3 < \pi_2 \leq \pi_1$), но пренебрежение вторичным эффектом ведет к недопустимо большой ошибке, и его необходимо принимать во внимание.

Поликристаллические пленки представляют собой совокупность гранул. Каждая гранула состоит из сегнетоэлектрического ядра, которое окружено переходным слоем толщиной порядка 1–2 нм с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon \sim 100\text{--}200$ (dead layer, passive layer) [14, 15]. Существование переходного слоя объясняется различными причинами (наличием барьера Шоттки, точечными дефектами, особенностями микроструктуры и т. д.), но независимо от причин возникновения этого слоя его вклад в электрические свойства гранулы можно заменить

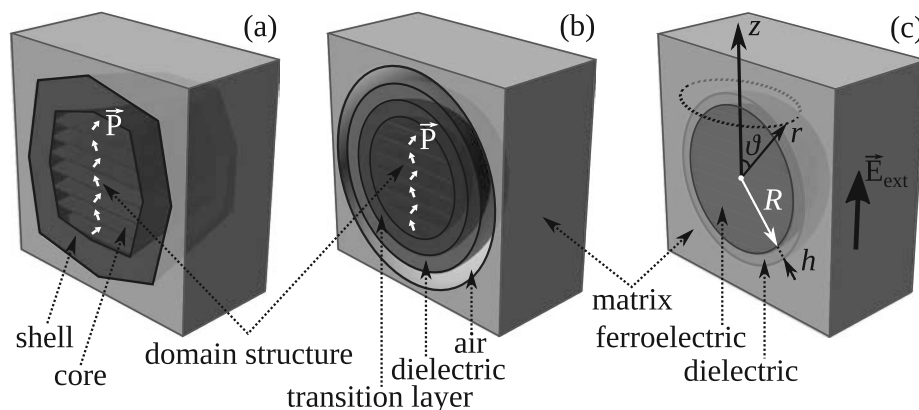


Рис. 1. Схема моделирования керамики: *a* — реальная гранула сегнетоэлектрической керамики с доменной структурой, определяющей поляризацию; *b* — пятифазная модель гранулы керамики, включающая два диэлектрических слоя и слой воздуха; *c* — упрощенная модель керамической гранулы, содержащая один эффективный диэлектрический слой

на вклад диэлектрического слоя с некоторой диэлектрической проницаемостью ϵ_d [16]. Такая замена возможна, если объем переходного слоя много меньше объема гранулы. При рассматриваемых соотношениях между толщиной диэлектрического слоя и размером гранулы это предположение, очевидно, выполняется. Наличие переходного слоя приводит к существенному изменению свойств сегнетоэлектрика. В частности, если размер гранулы меньше некоторого критического значения, оцениваемого в 10–30 нм для BaTiO_3 , то спонтанная поляризация в таких сегнетоэлектриках отсутствует [14, 17].

Существуют модели, где учитывается не один диэлектрический слой, а два. В модели работы [18] внутреннее ядро является сегнетоэлектриком, находящимся в тетрагональной фазе. Внешний слой также сегнетоэлектрик, но в кубической фазе. Для этих областей постоянные атомной решетки не изменяются, а для промежуточного слоя эти величины линейным образом зависят от координаты и обеспечивают переход от тетрагональной к кубической фазе.

Помимо одного или двух диэлектрических слоев при моделировании керамики следует принимать во внимание промежутки между гранулами — поры, которые заполнены газообразной средой, содержащей смесь воздуха и пары пластификатора. Наличие воздуха может быть учтено введением еще одного слоя, окружающего ядро гранулы, толщина которого определяется отношением плотности керамики к плотности кристаллического BaTiO_3 [6]. В результате получаем модель с тремя переходными слоями.

Эту модель можно упростить, если воздушный и оба диэлектрических слоя заменить на один эффективный, свойства которого определяются свойствами составляющих слоев. Для сферических пье-

зоэлектрических слоев постоянной толщины выражения для упругих и электрических постоянных эффективного слоя получены в работе [19]. К сожалению, толщина воздушного слоя, в отличие от диэлектрического, очень сильно меняется. Ввиду этого при задании свойств переходного слоя приходится использовать только качественные оценки. Таким образом, в качестве основной модели для изучения свойств керамики может рассматриваться система ядро–оболочка (core–shell), см. рис. 1.

Естественно предполагать, что ядро является сегнетоэлектрическим и его свойства описываются моделью ГЛД. В качестве формы ядра может рассматриваться шар, сфероид или эллипсоид. Эллипсоидальная модель гранулы приводит к появлению эллиптических интегралов как в случае чисто электростатической задачи [20], так и для пьезоэлектрической среды [21] и не может быть обобщена на случай нелинейно взаимодействующих электрического и упругого полей (электрострикции). Для сфероидальной модели гранулы (ядро–оболочка) решение электростатической задачи найдено в работе [22] при линейной зависимости поляризации от электрического поля.

В случае скалярной нелинейной модели ГЛ, даже без учета электроупругих эффектов (пьезоэлектричества, электрострикции), явные формулы возможно выписать только для электрического поля, параллельного одной из осей сфероида [23]. Учет упругости приводит к тому, что даже для сферической формы ядра строгое аналитическое решение задачи электроупругости не удастся получить из-за нелинейности свойств сегнетоэлектрика. Ее влияние на свойства гранулы можно учесть лишь при некоторых упрощающих предположениях, например, если не учитывать деформацию сдвига [6]. Если счи-

тать поляризацию в ядре постоянной, то деформация, возникающая вследствие электроупругих эффектов, является однородной. Хорошо известно, что общая однородная деформация может быть представлена в виде суммы однородного всестороннего (гидростатического) растяжения (или сжатия) и однородного сдвига [24]. Наличие сдвига приводит к появлению дополнительных компонент в электрическом поле и поляризации, т.е. к нарушению предположения о постоянстве и однородности поляризации.

Самым простым способом избежать возникающего противоречия является пренебрежение деформацией сдвига. Так как среднее значение деформации сдвига по шару равно нулю [24], суть подхода, предложенного в работе [6], заключается в замене локальных значений деформации в уравнении ГЛ на их средние по шару значения.

Некоторые характеристики керамики могут быть получены при использовании метода усреднений [15]. К сожалению, теория усреднений композитных сред хорошо разработана лишь для линейных уравнений [25–27] и не позволяет определять нелинейные свойства керамики. Например, можно с некоторой точностью определить значение постоянной Кюри C и температуры Кюри – Вейсса T_0 [15]. Но температура T_C , при которой спонтанная поляризация теряет стабильность, может быть получена только при решении нелинейных уравнений. Кроме того, методы усреднения дают более-менее точные формулы только тогда, когда концентрация включений не слишком значительна. В поликристаллической керамике гранулы составляют большую часть, их концентрация велика, что означает чрезвычайно низкую точность формул композитных сред для сегнетоэлектрической керамики. И, наконец, теория усреднения композитных сред предполагает одинаковые форму и размер включений.

Диэлектрическая проницаемость системы для всех формул усреднения композитных сред является непрерывной функцией от диэлектрической проницаемости включений и матрицы. Если диэлектрическая проницаемость включения имеет скачок, то и диэлектрическая проницаемость всего композита также имеет скачок. Для керамики это означает наличие разрывов первого рода для ее диэлектрической проницаемости, вычисленной по формулам усреднения композитов. Поскольку фазовый переход в керамике является размытым и диэлектрическая проницаемость является непрерывной функцией температуры, формулы усреднения композитов

для описания диэлектрической проницаемости керамики непригодны по крайней мере в некоторой окрестности фазового перехода.

Использование простых моделей линейной теории усреднения приводит к весьма неточной формуле для диэлектрической проницаемости керамики, причем некоторые другие важные характеристики (коэффициент управляемости, температура фазового перехода) в рамках указанного подхода не могут быть получены. Следовательно, для корректного описания свойств керамики нужно рассматривать модель гранулы, основанную на нелинейных уравнениях.

В данной работе исследуется модель гранулы, состоящая из шарообразного сегнетоэлектрического ядра радиуса R , покрытого диэлектрической оболочкой толщиной h и диаметром $d = 2(R+h)$ и помещенного в диэлектрическую среду (матрицу). Величина $\eta = h/R$ является малым параметром, что позволяет не учитывать величины, имеющие порядок η^3 и выше. Отношение объемов переходного слоя и сегнетоэлектрического ядра, как нетрудно проверить, равно 3η . Следовательно, при нахождении аддитивных физических величин для гранулы (например, теплоемкости) можно пренебречь вкладом переходного слоя. Его наличие оказывает влияние на распределение электрического и упругого полей в ядре, что приводит к изменению свойств гранулы.

Предполагается, что поляризация и напряженность электрического поля имеют только одну компоненту, которые обозначим через P и E . Предположения о наличии только одной компоненты у P и E достаточно при исследовании ЭКЭ, так как наибольшие значения ЭКЭ достигаются при температурах, близких к температуре фазового перехода от кубической к тетрагональной фазе. Зависимость $P(E)$ в ядре описывается полиномом пятого порядка, т.е. скалярной моделью ГЛ, учитывающей электрострикционные явления. Из-за нелинейности уравнений ГЛД любое изменение, ведущее к появлению нескольких компонент поляризации, приводит к задачам, для которых получение точных аналитических решений невозможно. В силу этого используется упрощающее предположение о замене деформации в шаре на ее средние значения, ранее использовавшееся в работе [6].

Электрострикционные свойства диэлектрического слоя описываются также в упрощенном варианте. Электрическое поле в матрице вдали от гранулы считается однородным. Помимо этого предполагается, что на гранулу со стороны матрицы действует гидростатическое давление p , возникающее вслед-

ствие электрострикции в матрице. Также предполагается, что из-за различия коэффициентов температурного расширения и постоянных решетки рассматриваемых сред в матрице, оболочке и грануле имеется деформация несоответствия. Чтобы понять характер зависимости свойств керамики от формы гранулы, параллельно со сферической моделью гранул исследуется цилиндрическая, поскольку шар и бесконечный цилиндр можно рассматривать как предельные случаи сфероида.

Основной целью работы является получение аналитических выражений для электрического и упругого полей в рассматриваемой системе ядро–оболочка–матрица и анализ зависимости диэлектрической проницаемости и ЭКЭ от R . Решение задачи электроупругости в трехфазной среде в отсутствие доменов получено в разд. 2, а влияние доменов рассматривается в разд. 3. Исследование ведется исключительно в рамках теории ГЛ, и все явления, выходящие за рамки этой теории, не рассматриваются.

2. ЭЛЕКТРОУПРУГОЕ ПОЛЕ В ГРАНУЛЕ

2.1. Основные уравнения электроупругости для сегнетоэлектриков

Свойства сегнетоэлектриков определяются тремя полями: электрическим, упругим и тепловым. Для их описания будем использовать потенциал φ , компоненты вектора смещений $u_i, i = 1, 2, 3$, и температуру T . По этим величинам определяется напряженность электрического поля $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ и тензор деформаций $u_{ik} = (u_{i,k} + u_{k,i})/2$. Здесь и далее индекс после запятой означает дифференцирование по соответствующей переменной, $X_{,i} = \partial X/\partial x_i$. Свободная энергия для кристалла кубической симметрии представляется в виде суммы нескольких слагаемых [6, 12, 15]:

$$F = F_0 + F_{GL} + F_{elast} + F_{str} + F_{thermo}, \quad (2)$$

где F_0 — не зависящая от поля часть свободной энергии, F_{GL} — энергия ГЛ,

$$F_{GL} = a\frac{P^2}{2} + b\frac{P^4}{4} + c\frac{P^6}{6} - EP - \varepsilon_0\frac{E^2}{2}, \quad (3)$$

F_{elast} — упругая энергия,

$$F_{elast} = \frac{c_{11}}{2}(u_{11}^2 + u_{22}^2 + u_{33}^2) + c_{12}(u_{11}u_{22} + u_{22}u_{33} + u_{33}u_{11}) + \frac{c_{44}}{2}(u_{12}^2 + u_{23}^2 + u_{13}^2), \quad (4)$$

F_{str} — энергия электрострикции,

$$F_{str} = -q_{11}u_{33}P^2 - q_{12}(u_{11} + u_{22})P^2, \quad (5)$$

а F_{thermo} — часть упругой энергии, зависящая от температуры,

$$F_{thermo} = \beta(u_{11} + u_{22} + u_{33})(T - T_g). \quad (6)$$

Здесь $\{a, b, c\}$ — феноменологические параметры ГЛ, $\{c_{11}, c_{12}, c_{44}\}$ — упругие постоянные в матричных обозначениях (Фойгта), $\{q_{11}, q_{12}\}$ — электрострикционные коэффициенты, T_g — температура, при которой термоупругие деформации отсутствуют, а коэффициент β связан с коэффициентом теплового расширения α соотношением $\beta = -(c_{11} + 2c_{12})\alpha$. От температуры T в стандартной модели ГЛ зависит только коэффициент $a = a_0(T - T_0)$, где $a_0 = 1/\varepsilon_0 C$, T_0 — температура Кюри–Вейсса, т. е. температура появления метастабильной параэлектрической фазы, C — постоянная Кюри и ε_0 — электрическая постоянная. Свободная энергия ГЛ аппроксимируется многочленом шестой степени (3), но никаких ограничений на аппроксимацию многочленом более высокой степени не возникает. В дальнейшем в свободную энергию (2) добавим градиентные слагаемые, вызванные существованием доменов.

Варьирование свободной энергии (2) по поляризации, компонентам вектора смещения и потенциалу приводит к уравнению ГЛ $\partial F/\partial P = 0$, закону Гука $\sigma_{ij} = \partial F/\partial u_{ij}$ и определению электрического смещения $D = \varepsilon_0 E + P$. Выпишем в развернутом виде уравнение ГЛ, связывающее напряженность электрического поля и поляризацию:

$$E = aP + bP^3 + cP^5 - 2P[q_{12}(u_{11} + u_{22}) + q_{11}u_{33}]. \quad (7)$$

Закон Гука при наличии электрострикции и теплового расширения принимает вид

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= c_{11}u_{11} + c_{12}u_{22} + c_{12}u_{33} + \beta(T - T_g) - q_{12}P^2, \\ \sigma_{22} &= c_{12}u_{11} + c_{11}u_{22} + c_{12}u_{33} + \beta(T - T_g) - q_{12}P^2, \\ \sigma_{33} &= c_{12}u_{11} + c_{12}u_{22} + c_{11}u_{33} + \beta(T - T_g) - q_{11}P^2, \\ \sigma_{23} &= 2c_{44}u_{23}, \quad \sigma_{13} = 2c_{44}u_{13}, \quad \sigma_{12} = 2c_{44}u_{12}. \end{aligned} \quad (8)$$

Для двумерной задачи закон Гука получается из (8) отбрасыванием части слагаемых, пропорциональных $u_{2,i}, i = 1, 2, 3$. Помимо соотношений (7), (8) введенные величины должны удовлетворять стандартным уравнениям электростатики и теории упругости [8]:

$$\operatorname{div} D = 0, \quad \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij,j} = 0. \quad (9)$$

Система уравнений (7)–(9) позволяет полностью определять упругое и электрическое поля в сегнетоэлектрическом образце, если заданы условия на внешних границах образца и границах раздела различных сред. В дальнейшем внутренние границы будем считать свободными от зарядов, что приводит к непрерывности нормальной составляющей электрического смещения. В задаче упругости будем требовать непрерывность нормальных составляющих тензора напряжений.

В силу нелинейного вхождения поляризации в уравнение (7) и в закон Гука (9) аналитическое решение системы (7)–(9) можно получить только в редких случаях. Одним из таких случаев является постоянство поляризации и деформации в сегнетоэлектрике. Эта возможность реализуется в неограниченном пространстве, когда решением уравнения (8) является

$$\begin{aligned} u_{11} = u_{22} &= \alpha(T - T_g) + Q_{12}P^2, \\ u_{33} &= \alpha(T - T_g) + Q_{11}P^2. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь Q_{12} , Q_{11} — коэффициенты электрострикции, связанные с напряжением [12], несколько различающиеся в плоской и пространственной задачах. Соотношения (10) означают, что тепловое расширение не зависит от направления, а различие коэффициентов электрострикции приводит к различной деформации по направлению электрического поля и поперек него. Постоянство поляризации позволяет вначале решать упругую задачу, а затем использовать полученное решение при исследовании уравнения ГЛ (7). Подчеркнем, что постоянство P требуется только в сегнетоэлектрическом ядре. В переходном слое и в матрице поляризация и деформация могут меняться произвольным образом в силу линейности описывающих их уравнений.

Цель дальнейшего — решение упругой задачи в трехфазной среде (ядро–оболочка–матрица) и исследование уравнения (7) при найденных значениях деформации и напряженности электрического поля.

Наличие доменов приводит к существованию областей, в которых направление поляризации и ее вклад в деформацию различны. Ввиду этого представим электрическое и упругое поля в среде в виде суммы двух слагаемых. Электростатическое поле разделим на то, которое существует из-за наличия внешнего поля E_{ext} , и деполяризационное поле, вызванное скачком поляризации на границе ядра. Аналогичным образом поступим с упругим полем.

2.2. Электростатическое поле в грануле

Одновременно будем рассматривать сферическую и цилиндрическую модели гранулы, поскольку уравнения электроупругости для цилиндрических и сферических координат различаются только несколькими коэффициентами. Параметр, который сопоставляется этим двум моделям, обозначим через n : $n = 2$ для сферической модели и $n = 1$ для цилиндрической. Будем полагать, что ядро имеет форму шара или круга (цилиндра) и обозначим его радиус через R .

Введем систему координат (r, ϑ) , начало которой разместим в центре ядра. Здесь r — расстояние до начала координат, а ϑ — полярный угол (см. рис. 1с). Гранула помещена во внешнее электрическое поле, напряженность которого есть E_{ext} и которое направлено параллельно оси z . Радиус внешней оболочки обозначим через $R + h$, где h — толщина диэлектрического слоя. Отношение $\eta = h/R$ считается малым, но требование малости η является чисто физическим, поскольку при уменьшении R и фиксированном h возникает необходимость строго учитывать третичные (градиентные) эффекты. Диэлектрические проницаемости слоя и матрицы обозначим через ε_d и ε_m . В дальнейшем индексами « f », « d », « m » будем снабжать (там, где это необходимо) физические величины в ядре, слое и матрице. Электрическое и упругое поля в шаре удовлетворяют уравнениям (7)–(10). Для упрощения вычислений будем предполагать, что матрица и слой не обладают ни пьезоэлектрическими, ни электрострикционными свойствами. Вначале рассмотрим электрическое и упругое поля в отсутствие доменов.

Наличие решения P_0 у системы (7)–(9) приводит к существованию потенциала φ_0 даже в отсутствие внешнего электрического поля E_{ext} . Так как φ_0 и связанное с ним упругое поле не меняются при изменении E_{ext} , вклад в диэлектрическую проницаемость они не дают. Ввиду этого в дальнейшем под потенциалом φ будем понимать ту часть потенциала, которая вызвана наличием внешнего поля. Этот потенциал в трехфазной системе ядро–гранула–матрица будем отыскивать точно в таком же виде, как и для диэлектрического шара, покрытого диэлектрической оболочкой [15, 23]:

$$\begin{aligned} \varphi_m &= \left(-r + A_m \frac{R^{n+1}}{r^n}\right) E_{ext} \cos \vartheta, \quad r > R + h, \\ \varphi_d &= \left(A_1 r + A_2 \frac{R^{n+1}}{r^n}\right) E_{ext} \cos \vartheta, \quad R < r < R + h, \\ \varphi_f &= A_f E_{ext} r \cos \vartheta, \quad r < R. \end{aligned} \quad (11)$$

При любых значениях постоянных $A_m, A_{1,2}, A_f$ потенциалы (11) являются решениями уравнения Лапласа, к которому сводится первое уравнение в (9).

Для определения перечисленных постоянных обратимся к граничным условиям непрерывности потенциала и нормальной компоненты электрического смещения. Подстановка (11) в граничные условия приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} -1 + A_m &= A_1 + A_2\rho, \\ -1 - nA_m &= (A_1 - nA_2\rho)\varepsilon_{dm}, \\ A_1 + A_2 &= A_f, \\ \varepsilon_d(B_1 - nB_2) &= A_f + \frac{P - P_0}{\varepsilon_0}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь введены обозначения $\rho = R^{n+1}/(R+h)^{n+1} = 1/(1+\eta)^{n+1}$, $\varepsilon_{dm} = \varepsilon_d/\varepsilon_m$. От толщины слоя в системе (12) зависит только коэффициент ρ . В случае диэлектрического шара в правой части последнего уравнения системы (12) влияние поляризации описывается множителем ε_f перед коэффициентом A_f , а сама поляризация отсутствует. При нелинейной зависимости поляризации от электрического поля эти величины необходимо рассматривать по отдельности.

Для записи решений системы (12) введем обозначения

$$\begin{aligned} b_{11} &= \varepsilon_d(n+1), \quad b_{21} = \varepsilon_{dm} + n - \rho n(1 - \varepsilon_{dm}), \\ b_{12} &= -(1 + \varepsilon_d n), \quad b_{22} = \rho n(1 - \varepsilon_{dm}), \\ \Delta &= b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}, \quad \kappa_f = \frac{(n+1)b_{11}}{\Delta}, \quad \lambda_f = \frac{b_{21}}{\Delta}. \end{aligned} \quad (13)$$

Выпишем только значения электрического поля в грануле:

$$E_f = \kappa_f E_{ext} + \frac{\lambda_f}{\varepsilon_0} (P - P_0). \quad (14)$$

Коэффициент κ_f назовем формфактором, λ_f — коэффициентом вторичной деполяризации, так как наличие первичного деполяризующего поля уже учтено в формфакторе. Отметим, что формула (14) является точной, вытекает из системы (12) при помощи элементарных алгебраических преобразований и никаких приближений не содержит. В эту формулу входят два значения электрического поля, вследствие чего она применима для описания нелинейных сред.

После определения электрического поля в грануле для нахождения поляризации из уравнения ГЛ остается только найти тензор деформаций. Решению этой задачи посвящен следующий раздел.

2.3. Деформации в трехфазной среде

Хорошо известно, что в диэлектрическом шаре или цилиндре, расположенном в диэлектрическом пространстве и помещенном в однородное внешнее поле, электрическое поле внутри является однородным. Для сегнетоэлектрического шара сохранение этого свойства возможно в том случае, когда тензор деформации в шаре постоянен. Из предположения об однородности поляризации в уравнениях (8) вытекает однородность деформации. Общая однородная деформация может быть представлена в виде суммы однородного всестороннего (гидростатического) растяжения (или сжатия) и однородного сдвига [24]. Наличие сдвига приводит к появлению зависимости деформации от угла ϑ , т. е. к нарушению предположения об однородности поляризации. Поскольку среднее значение деформации сдвига по шару равно нулю [24], этой частью деформации можно пренебречь и рассматривать только всестороннее сжатие.

В силу симметрии как нагрузки, так и исследуемой системы единственной отличной от нуля компонентой вектора смещения будет радиальная u_r . Ненулевые компоненты тензора деформации при этом имеют вид [24]

$$u_{rr} = u_{r,r}, \quad u_{\vartheta\vartheta} = u_r/r.$$

На границах разделов сред (при $r = R, R+h$) должны быть непрерывны смещение u_r и σ_{rr} . При отсутствии гранулы в матрице задается ненулевая компонента тензора деформации $\sigma_{rr}^{(m)} = -p$. Давление p включает в себя силу, возникающую вследствие различных коэффициентов температурного расширения, электрострикции в матрице и деформации несоответствия с переходным слоем.

Для удобства записи последующих вычислений введем обозначения

$$K_n = c_{11} + nc_{12}, \quad \mu = c_{11} - c_{12}.$$

Коэффициент K_n есть коэффициент всестороннего сжатия, а коэффициент μ с точностью до множителя 2 совпадает с одним из коэффициентов Ламе [24]. В ядре из деформации выделим однородное сжатие, вызванное электрострикцией $Q_{nf}P^2$, где Q_n — среднее значение электрострикционных коэффициентов,

$$Q_2 = (Q_{11} + Q_{12})/2,$$

$$Q_3 = (Q_{11} + 2Q_{12})/3.$$

Предположим, что в переходном слое никакие силы не действуют. Принимая во внимание общее решение уравнений упругости в случае гидростатических сил [24] и условия в нуле и на бесконечности, будем

отыскивать радиальную компоненту вектора смещения в виде

$$\begin{aligned} u_r^{(m)} &= -\frac{pr}{K_{nm}} + B_m \frac{R^{n+1}}{r^n}, \quad r > R + h, \\ u_r^{(d)} &= B_1 r + B_2 \frac{R^{n+1}}{r^n}, \quad R < r < R + h, \\ u_r^{(f)} &= (Q_{nf} P^2 + B_f) r, \quad r < R. \end{aligned} \quad (15)$$

Для нахождения неизвестных коэффициентов $B_m, B_{1,2}, B_f$ из граничных условий получаем систему

$$\begin{aligned} B_f - B_1 - B_2 &= -Q_n P^2, \\ B_1 + B_2 \rho - B_m \rho &= -\frac{p}{K_{nm}}, \\ B_f K_{nf} - B_1 K_{nd} - n B_2 \mu_{nd} &= -Q_n K_{nf} P^2, \\ B_1 K_{nd} + n \rho B_2 \mu_d + n \rho B_m \mu_m &= -p. \end{aligned} \quad (16)$$

Представим давление p в виде слагаемого, пропорционального разности температур $T - T_g$, и слагаемого p_0 , не зависящего от температуры, $p = p_0 + \bar{\alpha}(T - T_g)$. Здесь $\bar{\alpha}$ — некоторый эффективный коэффициент температурного расширения, определяемый различием коэффициентов $\alpha_m, \alpha_d, \alpha_f$. Поскольку в правой части системы (16) имеются три различные величины, $\bar{\alpha}(T - T_g)$, p_0 и $Q_n P^2$, каждый коэффициент B_i представляется в виде трех слагаемых:

$$B_i = p_0 B_{ip} + Q_n P^2 B_{iq} + \bar{\alpha}(T - T_g) B_{iT}, \quad (17)$$

$$i = m, 1, 2, f.$$

Введенные коэффициенты $B_{ip,q,T}$ определяются только упругими коэффициентами трех фаз и коэффициентом ρ , который задает зависимость от размера гранулы. Их явный вид не выписываем в силу их громозкости. Из определения тензора деформаций и закона Гука (8) получаем следующие выражения для тензоров деформации и напряжений:

$$\begin{aligned} u_{11} = u_{22} = u_{33} &= Q_n P^2 + B_f = \\ &= (B_{fq} + Q_n) P^2 + \bar{\alpha}(T - T_g) B_{f\alpha} + p_0 B_{fp}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} &= \\ &= K_{nf} u_{11} + K_{nf} \bar{\alpha}(T - T_g) - Q_n K_{nf} P^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Равенств (7), (13), (14), (18) достаточно для описания зависимости поляризации в грануле от температуры и электрического поля для монодоменного сегнетоэлектрика. Напомним, что для цилиндра следует положить $u_{22} = 0, \sigma_{22} = 0$.

3. УЧЕТ ДОМЕННЫХ СТЕНОК

3.1. Модель Киттеля – Мицуи – Фуруиши

В приведенных выше рассуждениях влияние доменов на электроупругое поле не учитывалось, что возможно для монодоменного сегнетоэлектрика. Поскольку, начиная с некоторого размера гранулы, число доменов возрастает с увеличением размера гранулы, необходимо при расчетах принимать во внимание и доменную структуру в грануле. Существование периодических термодинамически стабильных доменов с противоположно направленными магнитными полями было впервые предсказано Ландау и Лифшицем в 1935 г. [28]. Наличие доменов минимизирует деполяризационное поле, возникающее из-за разрыва намагниченности на границах образца. Учет энергии доменных стенок позволяет найти зависимость периода w доменной структуры от толщины образца H . Спустя 11 лет Киттель [29] пришел к выводу, что $w \propto \sqrt{H}$. Для сегнетоэлектриков аналогичную зависимость впервые получили Мицуи и Фуруиши [30]. Вследствие этого, модель доменной структуры, в которой толщиной доменной стенки пренебрегают, в теории сегнетоэлектричества принято называть моделью Киттеля – Мицуи – Фуруиши (КМФ) [31]. Период w в этой модели определяется минимумом свободной энергии, в которую входит энергия доменных стенок и электростатическая энергия деполяризующего поля. Составляющие свободной энергии по-разному ведут себя при $w \rightarrow 0$ и $w \rightarrow \infty$: если одна составляющая неограниченно возрастает, то вторая убывает до нуля. Из-за этого и существует значение w , которое дает минимум свободной энергии.

В данной статье идеи указанных выше работ используются для определения зависимости расстояния между доменными стенками (толщины доменов w) в сегнетоэлектрическом шаре или цилиндре, покрытом диэлектрической оболочкой и помещенном в диэлектрическую матрицу. Представим часть термодинамического потенциала F_D , зависящую от существования доменов, в виде суммы трех слагаемых:

$$F_D = F_{DW} + F_{dep} + F_{D_{elast}}, \quad (20)$$

где F_{DW} — энергия доменных стенок, F_{dep} — энергия деполяризации, $F_{D_{elast}}$ — часть упругой энергии, зависящая от доменов.

Рассмотрим шар радиуса R , в котором имеется ламинарная доменная структура (см. рис. 1b). Будем рассматривать случай, когда число доменов N велико, $N \gg 1$. Расстояние между доменами предполага-

ется постоянным и связанным с их числом простым соотношением $w = 2R/N$. Энергию одиночной доменной стенки обозначим через ζ . Тогда удельная энергия всех доменных стенок есть

$$F_{DW} = \frac{\zeta}{V} \sum_{n=1}^{N-1} S_n = \frac{\zeta}{w} - \frac{\zeta w}{4R^2}, \quad (21)$$

где V — объем шара, S_n — площадь доменной стенки с номером n . Вторым слагаемым в (21) будем пренебрегать, так как оно может быть включено в оставшуюся часть энергии F_D , пропорциональную w . Для круга формула (21) остается справедливой, если заменить объем шара V на площадь круга. Меняется только второе слагаемое.

Как следует из экспериментальных результатов работы [32], наличие свободных зарядов на границах гранулы уменьшает электрическое поле, связанное с доменами, до пренебрежимо малых значений, т. е. можно положить $F_{dep} = 0$. Это означает, что изменение поляризации, особенно сильное вблизи выхода доменов на границу ядра, приводит к неприменимости модели ГЛ и необходимости выхода за ее пределы. Ввиду этого будем использовать общие свойства F_{Delast} и малость параметра w/R . Для этого разложим F_{Delast} в ряд Маклорена по степеням w/R и ограничимся только двумя первыми ненулевыми членами ряда. Постоянное слагаемое в этом ряду будет отсутствовать, так как при $w \rightarrow 0$ упругая энергия, связанная с доменами, исчезает,

$$F_{Delast} = U_1 \frac{w}{R} + \frac{U_2}{2} \frac{w^2}{R^2}. \quad (22)$$

Коэффициенты U_1 и U_2 есть постоянные, которые равны соответственно первой и второй производным от F_{Delast} по w/R при $w = 0$. Для последующих выкладок удобнее заменить разложение (22) на эквивалентное ему:

$$F_{Delast} = U_1 \frac{w}{R} \left(1 + t \frac{w}{R}\right)^{-1}, \quad (23)$$

в котором параметр $t = -U_2/2U_1$. Выбор разложения (23) вместо (22) продиктован следующими обстоятельствами. Во-первых, аналогичный (23) вид имеет разложение деполаризующей энергии в задаче о доменах в полосе [31, 33]. Во-вторых, при больших значениях w выражение (22) приводит к росту F_{Delast} , а из общефизических соображений следует, что эта энергия остается конечной, что соответствует разложению (23). И наконец, разложение (23) приводит к более простым формулам для зависи-

мости $w(R)$. В результате приходим к следующему выражению для F_D :

$$F_D = \frac{\zeta}{w} + U_1 \frac{w}{R} \left(1 + t \frac{w}{R}\right)^{-1}. \quad (24)$$

Условие минимальности F_D позволяет определить искомую зависимость толщины доменов от радиуса шара:

$$w = \sqrt{RL_K} \left(1 - t \sqrt{\frac{L_K}{R}}\right)^{-1}. \quad (25)$$

Характерная длина Киттеля в (25) определяется через параметры ζ и U_1 следующим образом: $L_K = \zeta/U_1$. Как следует из формулы (25), толщина w доменной структуры при больших значениях R стремится к величине $\sqrt{L_K R}$, т. е. закон Киттеля справедлив не только для доменной структуры в слое [31], но и для шара и цилиндра. Зависимость $w(R)$ имеет минимум при некотором значении $R = R_{min}$. При $R < R_{min}$ толщина доменов должна неограниченно увеличиваться при уменьшении размера гранулы. Для слоя [31, 33] увеличение происходит по экспоненциальному закону. Это связано со свойствами решения уравнения Лапласа в плоском случае: если по одной координате имеются осцилляции, то по другой координате должно быть экспоненциальное убывание или экспоненциальный рост. В полярной и сферической системах координат осциллирующее по углу решение уравнения Лапласа по радиальной координате убывает или растет степенным образом.

Из анализа выражения (25) следует, что минимальное значение F достигается при $R_{min} = 4t^2 L_K$, а при $R \rightarrow R_\infty = t^2 L_K$ толщина домена стремится к бесконечности. Отметим, что радиусы R_{min} и R_∞ связаны простым соотношением $R_{min} = 4R_\infty$. Характерную длину Киттеля выберем равной $L_K = 20$ нм как среднее экспериментальных зависимостей $w(R)$ [34–36]. Безразмерный параметр t при данном значении L_K может быть получен, если известно значение R_{min} . Основываясь на оценках [31], положим $t = 0.5$, что приводит к $R_\infty = 1.25$ нм.

Поскольку деформация u_{ii}^{DW} , вызванная существованием доменов, в рамках теории ГЛ не определяется, ее также оценим, исходя из общефизических соображений. Эта деформация вызвана эффектом электрострикции. Будем предполагать u_{ii}^{DW} деформацией всестороннего растяжения, пропорциональной P^2 :

$$u_{11}^{DW} = u_{22}^{DW} = u_{33}^{DW} = \xi Q P^2,$$

где $\xi = \xi(R)$ — некоторый безразмерный параметр. Можно показать, что при больших значе-

ниях $R > 2$ мкм, когда число доменных стенок N велико, параметр ξ обратно пропорционален N , $\xi \propto w/R$ [32,37]. Данное соотношение является следствием отбрасывания той части деформации, среднее значение которой есть нуль. При меньших значениях радиуса отброшенные слагаемые начинают вносить все большую погрешность. К тому же при малых R становится трудно оценить вклад доменов у полюсов шара. Для монодоменного состояния величина ξ не зависит от N и пропорциональна некоторой степени R . В качестве функции, которая при больших R ведет себя как $R^{-1/2}$, а при малых — как $R^{1/2}$, выберем корень из дробно-линейной функции. В результате получаем

$$\xi = \xi_0 \sqrt{\frac{L_K R}{R^2 + s^2}}, \quad (26)$$

$$u_{11}^{DW} = u_{22}^{DW} = u_{33}^{DW} = \xi_0 Q P^2 \sqrt{\frac{L_K R}{R^2 + s^2}},$$

где ξ_0 и s — некоторые феноменологические параметры. Как следует из (26), при $R = s$ деформация имеет экстремум.

Для обоснования формы зависимости $\xi(R)$ в (26) введем в рассмотрение коэффициент тетрагональной деформации v , который определяется отношением параметров элементарной ячейки от единицы [31]. Коэффициент v связан с деформацией электрострикции простым соотношением $v = \hat{Q} P^2$, где $\hat{Q}$ есть некоторая линейная комбинация коэффициентов электрострикции (формула (2) в [38]). Поскольку именно электрострикция приводит к изменению феноменологического параметра ГЛ b , зависимость $b(R)$ полностью определяется зависимостью $v(R)$. Значит, зависимость коэффициентов v и ξ от размера гранулы должна быть одинаковой.

Экспериментально полученная зависимость $v(R)$ состоит из двух участков. При малых R ($R < 0.5$ мкм) эта зависимость является линейной, при $R > 0.7$ мкм зависимость v от размера гранулы пропадает (см. [32], рис. 6). Переход от линейной к постоянной зависимости $v(R)$ происходит в интервале $0.5 \text{ мкм} < R < 0.7 \text{ мкм}$. Имеющихся экспериментальных данных для однозначного определения зависимостей $v(R)$ и $\xi(R)$ недостаточно, поэтому в качестве аппроксимации $\xi(R)$ выбрана зависимость (26), которая обеспечивает переход от линейной к постоянной зависимости как для $v(R)$, так и для $\xi(R)$.

4. ЭЛЕКТРОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ГРАНУЛЕ

4.1. Определение феноменологических параметров для гранулы

При проведении расчетов будем рассматривать керамику титаната бария и использовать известные значения коэффициентов Ландау [39]:

$$a = 2.06 \cdot 10^5 (T - 388) \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2},$$

$$b = -5.24 \cdot 10^7 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5 \cdot \text{Кл}^{-4},$$

$$c = 2.6 \cdot 10^8 \text{ Дж} \cdot \text{м}^9 \cdot \text{Кл}^{-6}.$$

Величины коэффициентов электрострикции и значения упругих постоянных были взяты из работы [40]:

$$q_{11} = 14.20 \cdot 10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2},$$

$$q_{12} = -0.74 \cdot 10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2},$$

$$c_{11} = 27.50 \cdot 10^{10} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3},$$

$$c_{12} = 17.90 \cdot 10^{10} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3},$$

$$c_{44} = 5.43 \cdot 10^{10} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3}.$$

Энергия доменной стенки ζ определялась по приведенным выше постоянным и градиентному коэффициенту $g = 51 \cdot 10^{-11} \text{ Дж} \cdot \text{м}^3 \cdot \text{Кл}^{-2}$ по формулам (25), (26) из [40]. Как следует из формул (7), (14), (18), (26), зависимость поляризации в грануле от внешнего электрического поля описывается уравнением

$$\hat{\kappa} E_{ext} = \hat{a} P + \hat{b} P^3 + c P^5 \quad (27)$$

с параметрами термодинамического разложения $\hat{\kappa}(R), \hat{a}(R), \hat{b}(R)$, зависящими от размера гранулы, и постоянным коэффициентом c . Уравнение (27) есть следствие предположения, что вклады в феноменологические параметры ГЛ, вызванные существованием доменов, наличием переходного слоя, упругими свойствами гранулы, не зависят друг от друга. Это означает, что в зависимостях параметров $\hat{\kappa}(R), \hat{a}(R), \hat{b}(R)$ ограничиваемся только линейными по η и ξ величинами:

$$\hat{\kappa} = \kappa + \kappa_1 + \kappa_h \eta,$$

$$\hat{a} = a_0(1 + k_{a1} + k_{a2}\eta)T - T_0(1 + k_{a3} + k_{a4}\eta), \quad (28)$$

$$\hat{b} = b(1 + k_{b1} + k_{b2}\eta + k_D \xi).$$

Здесь κ есть формфактор в отсутствие переходного слоя. Коэффициенты κ_1, κ_h, k_i , $i = a1, a2, a3, b1, b2$, которые определяют упругими свойствами гранулы и наличием переходного слоя, могут быть получены из формул (14), (15), (17), (18) при подстановке в уравнение ГЛ (7). Единственным коэффициентом, который вызван существованием доменов, является

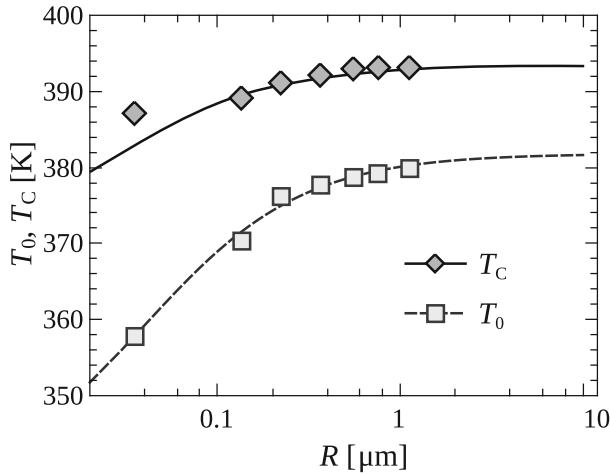


Рис. 2. Зависимость температуры Кюри–Вейсса T_0 и температуры фазового перехода T_C от радиуса R шарообразной гранулы. Результаты теоретических расчетов по формуле (29) представлены кривыми, символы — экспериментальные данные [42]. Для экспериментальных точек параметр R соответствует половине размера гранулы

$k_D = -6Q^2/b$. В дальнейшем коэффициент перед температурой в выражении для $\hat{a}$ обозначим через $\hat{a}_0 = a_0(1 + k_{a1} + k_{a2}\eta)$.

Определение феноменологических параметров ГЛ начнем с формфактора. Заменим разность $(P - P_0)\varepsilon_0$ в формуле (14) на χE_f , где χ есть относительная восприимчивость. Зависимость электрического поля в грануле от η в первом приближении учитывать не будем и, пренебрегая величинами порядка χ^{-1} , положим $\hat{\kappa}(R) = \kappa = 1$. Пренебрежение зависимостью от размера гранулы в формфакторе возможно только для описания некоторых эффектов, для которых зависимость от электрического поля не является определяющей. При нахождении коэрцитивного поля или при описании электрического гистерезиса необходимо считать κ функцией R .

Поскольку свойства переходного слоя, как и величина давления p , известны весьма приблизительно, то постоянные слагаемые в феноменологических параметрах ГЛ положим равными нулю ($k_{a3} = 0, k_{b1} = 0$) и будем использовать следующие оценки для параметров: $h = 2$ нм, $k_{a1} = -1$, $k_{a2} = 4$. Зависимости температуры Кюри–Вейсса T_0 и температуры фазового перехода T_C от размера гранулы в соответствии с выражением (27) и теорией фазовых переходов первого рода [41] задаются соотношениями

$$\begin{aligned} T_0(R) &= T_0 \frac{1 + k_{a4}\eta}{1 + k_{a2}\eta}, \\ T_C(R) &= T_0(R) + \frac{3\hat{b}^2}{16\hat{a}_0c}. \end{aligned} \quad (29)$$

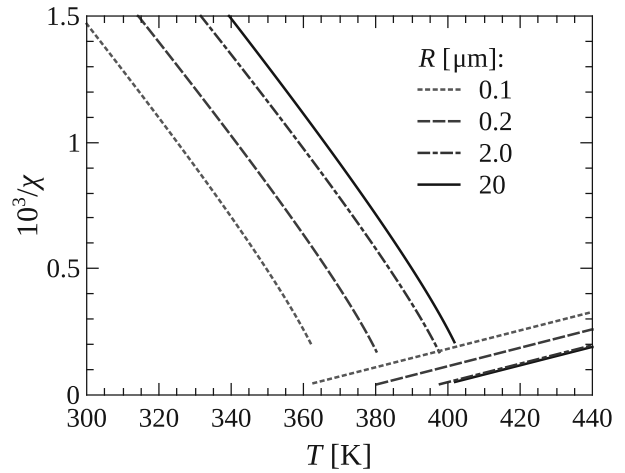


Рис. 3. Температурная зависимость обратной диэлектрической восприимчивости χ^{-1} при различных значениях радиуса шарообразной гранулы

Графики зависимостей $T_0(R)$ и $T_C(R)$ представлены на рис. 2. Эти температуры монотонно убывают с уменьшением размера гранулы, причем закон убывания близок к гиперболическому и хорошо согласуется с экспериментальными данными для керамики титаната бария [42]. Для реальной керамики каждая гранула имеет свою форму, и эта форма отличается от шарообразной. Поскольку керамика состоит из множества гранул, ее свойства можно рассчитывать исходя из усредненной формы гранул. Проведенные в [42] измерения показали близость формы гранулы к шарообразной, что позволяет использовать экспериментальные данные этой работы для сравнения с разработанной выше теорией.

Температурная зависимость обратной диэлектрической восприимчивости, рассчитанная по формуле

$$\varepsilon_0\chi = \frac{\partial P}{\partial E} = \frac{1}{\hat{a} + 3\hat{b}P^2 + 5cP^5}, \quad (30)$$

представляется в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_0\chi} &= 4\hat{a}_0(T_C(R) - T_0(R)) \left[\frac{1}{3} + \frac{T_C(R) - T}{T_C(R) - T_0(R)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{3} \sqrt{1 + 3 \frac{T_C(R) - T}{T_C(R) - T_0(R)}} \right], \quad T < T_C(R), \quad (31) \\ \frac{1}{\varepsilon_0\chi} &= \hat{a}_0(T - T_0(R)), \quad T \geq T_C(R). \end{aligned}$$

Отметим, что рассчитывалась величина χ для отдельной гранулы. Зависимость от температуры величины χ^{-1} представлена на рис. 3.

Для расчета диэлектрической проницаемости керамики необходимо принять во внимание закон распределения гранул по размерам, что приводит к исчезновению точек разрыва графика [6] и различию

диэлектрических проницаемостей керамики и гранулы. Тем не менее есть несколько величин, которые примерно одинаковы для гранулы и для керамики: максимальные значения диэлектрической проницаемости и температур T_C и T_0 . Наибольшее значение диэлектрической восприимчивости в теории ГЛ достигается при температуре фазового перехода и равно $1/\varepsilon_0 \hat{a}_0 [T_C(R) - T_0(R)]$. Если имеется множество гранул, размер которых распределен по некоторому закону с наиболее вероятным значением $R = \bar{R}$, то для оценки максимального значения восприимчивости выберем значение при $T = T_C(\bar{R})$. Это значение при любом законе распределения гранул является сглаженным и равно полусумме предельных значений для температуры разрыва [43]:

$$\chi_m(\bar{R}) = \frac{\chi(\bar{R}, T_C(\bar{R}) + 0) + \chi(\bar{R}, T_C(\bar{R}) - 0)}{2} = \frac{0.625}{\varepsilon_0 \hat{a}_0 (T_C(R) - T_0(R))}. \quad (32)$$

График зависимости $\varepsilon_m(\bar{R}) = \chi_m(\bar{R}) + 1$ изображен на рис. 4. Важным моментом является наличие максимума этой зависимости. Ни одна из предложенных ранее моделей не могла объяснить его существование количественно. В настоящей работе максимум $\varepsilon_m(\bar{R})$ при $R = 0.6$ мкм объясняется предложенной зависимостью $\hat{b}(R)$, вызванной наличием доменов.

При сравнении с экспериментальными данными для $\varepsilon_m(\bar{R})$ [42] теоретические значения диэлектрической восприимчивости (32) умножались на относительную плотность керамики, равную 0.9. Представленные на рис. 2, 4 графики однозначно говорят о применимости разработанной теории.

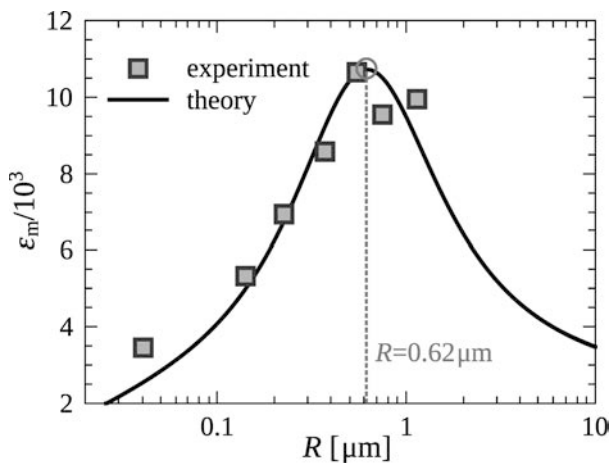


Рис. 4. Зависимость максимальной диэлектрической проницаемости титаната бария от радиуса шарообразной гранулы. Экспериментальные значения взяты из [42] и отвечают среднему размеру гранулы

4.2. Термодинамика электрокалорического эффекта в грануле

Как уже говорилось выше, в силу малого влияния переходного слоя на ЭКЭ будем принимать во внимание только тепловые свойства ядра. Индекс у поляризации в дальнейшем будем опускать, так как ни слой, ни матрица в последующих рассуждениях не участвуют. Будем считать деформацию функцией температуры и поляризации. Плотность энтропии $S = -\partial F/\partial T$ для свободной энергии (2) имеет вид

$$S = S_0(T) - \frac{\hat{a}_0}{2} P^2 - \beta v - \sum_{i,j} \sigma_{ij} \frac{\partial u_{ij}}{\partial T}. \quad (33)$$

Здесь через v обозначен след тензора деформации $v = u_{11} + u_{22} + u_{33}$, а $S_0 = -\partial F_0/\partial T$. Отметим, что обычно ограничиваются только первыми двумя слагаемыми в правой части (33). Третье слагаемое учитывает влияние упругой деформации, вызванной тепловым расширением ядра гранулы. Последнее слагаемое описывает эластокалорический эффект [9]. Качественные оценки показывают, что вклад третьего слагаемого в энтропию превосходит вклад четвертого, а их общий вклад в часть энтропии, зависящей от поля $(S - S_0)$, может составлять до 40%, что согласуется с оценками [11]. Формула (33) является универсальной и применима для тел произвольной формы и для произвольных процессов. В частности, она описывает изменение энтропии при одновременном воздействии электрического и упругого полей, т.е. при мультикалорическом эффекте.

Для дифференциала энтропии в случае изменения только электрического поля справедлива формула

$$dS = \frac{\partial S}{\partial T} dT + \frac{\partial S}{\partial E_{ext}} dE_{ext}. \quad (34)$$

Коэффициент при дифференциале электрического поля называется пирозлектрическим коэффициентом, $\pi \equiv \partial S/\partial E$,

$$\pi = \frac{\partial P}{\partial T} - \beta \frac{\partial v}{\partial E_{ext}} - \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial E_{ext}} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_{ij}}{\partial T} \right). \quad (35)$$

Разделить пироккоэффициент π на три слагаемых, как в соотношении (1), не представляется возможным из-за нелинейного характера зависимости поляризации. Первое слагаемое определяется не только электрическим полем (первичный эффект), но и зависимостью от упругого поля (вторичный эффект) и градиента поляризации (третичный эффект).

Для энтропии, задаваемой формулой (33), коэффициент π в (35) отличается от широко используемого равенства $\pi = \partial P/\partial T$ [41], поскольку дефор-

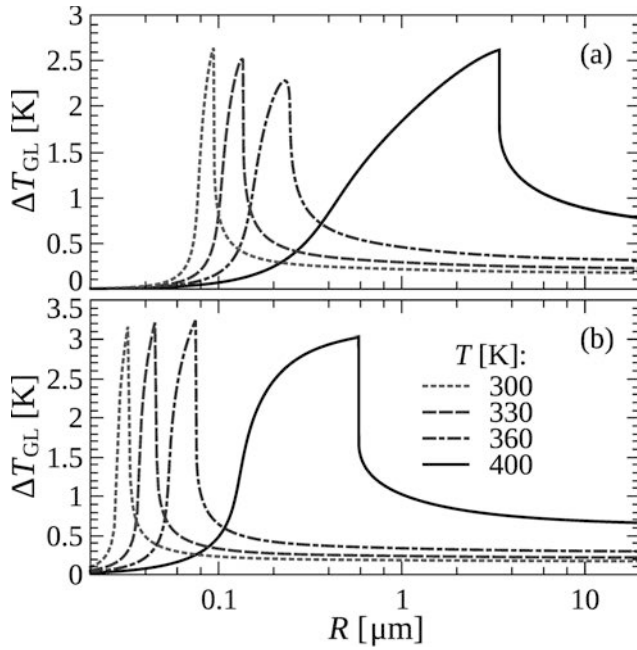


Рис. 5. Зависимости изменения температуры ΔT_{GL} , определяемого свободной энергией F_{GL} , от размера шарообразной (a) и цилиндрической (b) гранул при различной температуре среды и изменении электрического поля 2 МВ/м

мания из-за эффекта электрострикции зависит от электрического поля. Наличие дополнительных слагаемых в (33) приводит к отличию величины ΔT , измеренной в эксперименте, от рассчитанной через $\partial P / \partial T$. Коэффициент при дифференциале температуры выражается через теплоемкость C_E при постоянном электрическом поле, $(\partial S / \partial T)_E = C_E / T$. Во введенных обозначениях уравнение ЭКЭ в дифференциалах записывается в виде

$$dT = -\frac{\pi T}{C_E} dE_{ext}. \quad (36)$$

Несмотря на то, что дифференциальное уравнение (34) имеет очевидный интеграл $S = \text{const}$, изменение температуры обычно записывают в виде

$$\Delta T = -\int_{E_i}^{E_f} \frac{\pi T}{C_E} dE_{ext}. \quad (37)$$

Коэффициент $\gamma = -\pi T / C_E$ называется электрокалорическим коэффициентом. Формула (37) не очень удобна для расчетов из-за наличия интеграла и изменения теплоемкости C_E с изменением электрического поля. Поэтому предпочтительнее использовать теплоемкость C_P [44, 45]. Для этого в качестве независимой переменной выберем поляризацию P , а напряженность электрического поля будем считать ее функцией, $E_{ext} = E_{ext}(P)$. Энтропия S не зависит от E_{ext} , а зависимость от поляризации вхо-

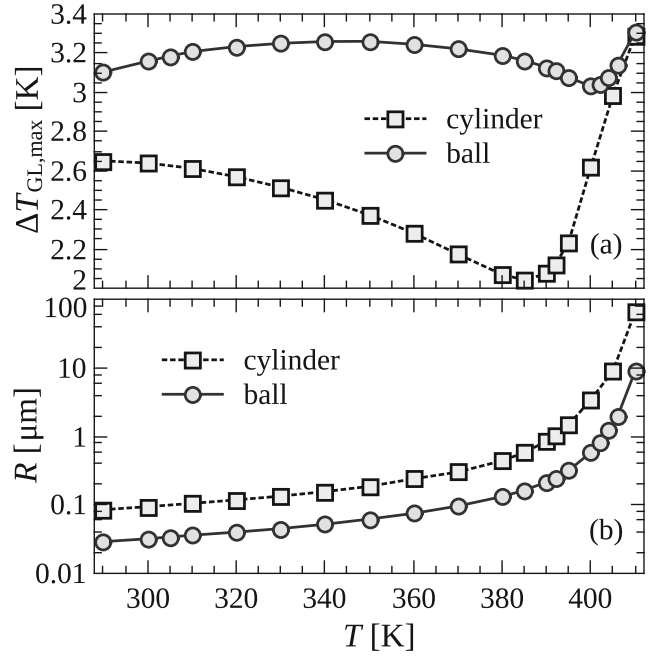


Рис. 6. a) Температурная зависимость максимального по R изменения температуры ΔT_{GL} при ЭКЭ и b) соответствующие размеры гранул шарообразной и цилиндрической формы при изменении электрического поля 2 МВ/м

дит только через деформацию. Вклад деформации в энтропию, вызванный эффектом электрострикции, в несколько раз меньше вклада электрического поля. Следовательно, изменение теплоемкости C_E при приложении электрического поля значительно больше изменения теплоемкости C_P , которую можно считать не зависящей от поля и равной теплоемкости в отсутствие поля $C_0 = \partial S_0 / \partial T$. Изменением $C_P = C_0$ в адиабатическом процессе можно пренебречь, но можно аппроксимировать C_P линейной функцией от температуры [46]. Тогда изменение температуры при ЭКЭ представляется в виде суммы трех слагаемых:

$$\begin{aligned} \Delta T &= \Delta T_{GL} + \Delta T_{thermo} + \Delta T_{elast} \equiv \\ &\equiv -\frac{T}{C_P} (\Delta S_{GL} + \Delta S_{thermo} + \Delta S_{elast}). \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь изменение энтропии относится только к ее части, которая зависит от электрического поля. Изменение энтропии электрострикции включено в ΔT_{GL} . Первое слагаемое описывает первичный ЭКЭ, второе и третье — вторичный. Основной вклад в ΔT вносят первые два слагаемых, которые имеют вид

$$\Delta S_{GL} = \frac{\hat{a}_0}{2} (P_f^2 - P_i^2), \quad \Delta S_{thermo} = \beta(v_f - v_i). \quad (39)$$

Здесь индекс «i» относится к начальному состоянию системы, а индекс «f» — к конечному, которые задаются напряженностями E_i и E_f соответственно.

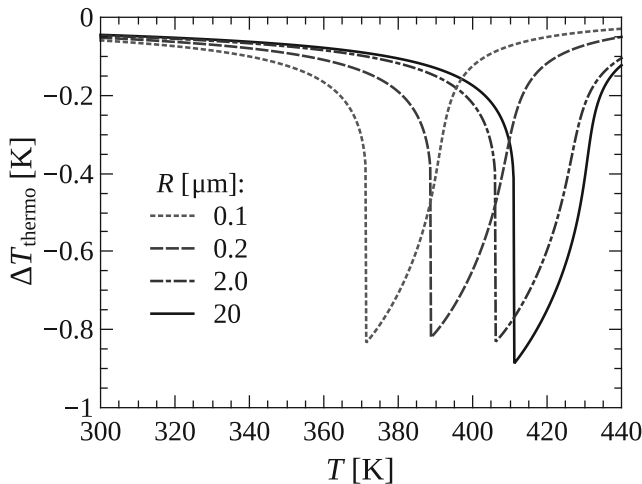


Рис. 7. Температурные зависимости изменений температуры ΔT_{thermo} для различных размеров шарообразной гранулы. Изменения вызваны тепловым расширением при изменении электрического поля 2 МВ/м

Зависимости ΔT_{GL} и ΔT_{thermo} представлены на рис. 5–7. Как следует из полученных кривых, зависимость изменения температуры от размера гранулы подобна зависимости от температуры Кюри – Вейсса: уменьшение T_0 , как и уменьшение R , ведет к сдвигу максимума ΔT_{GL} . Но зависимость от R является более сложной, так как происходит не только сдвиг кривой $\Delta T_{GL}(R)$, но и изменение ее формы. Меняется как ширина указанной кривой, так и величина максимума по температуре, представленная на рис. 6. Наиболее сильно температурные зависимости ΔT_{GL} и ΔT_{thermo} меняются при температуре Кюри – Вейсса, где они имеют разрыв первого рода. Уменьшение радиуса гранулы приводит к уменьшению температуры T_0 , т. е. к смещению точки разрыва в сторону низких температур.

Следует также подчеркнуть сильную зависимость ЭКЭ от формы гранулы. Величины ЭКЭ для сферической и цилиндрической гранул становятся примерно одинаковыми только при температурах, превышающих температуру фазового перехода. Также обратим внимание на различные знаки ЭКЭ, вызванные изменением поляризации и наличием теплового расширения. Как видно на рис. 7, уменьшение суммарного ЭКЭ из-за вклада теплового расширения составляет 20–30%.

5. ВЫВОДЫ

В работе предложено рассматривать керамику как нелинейную композитную среду, в которой включения имеют форму шара, покрытого переходным слоем и помещенного в диэлектрическую мат-

рицу. Свойства переходного слоя определяются как диэлектрическим слоем, так и наличием воздушных пор в керамике. В предположении однородности поляризации удалось решить задачу электроупругости для одиночной гранулы при отсутствии доменов и найти вклад упругих свойств гранулы в параметры уравнения ГЛ.

Учет доменов в предложенном варианте модели КМФ для шарообразной гранулы приводит к точно решаемым задачам электростатики и упругости, но их решение не может быть использовано для определения зависимости феноменологических параметров ГЛ от размера гранулы из-за наличия свободных зарядов, приводящих к исчезновению деполяризующего поля на границе гранулы. Зависимость размера доменов w задавалась первыми коэффициентами разложения упругой энергии гранулы в ряд по параметру $\eta = w/R$ (формула (24)). Для соответствия экспериментальной зависимости $\hat{b}(R)$ был введен феноменологический параметр s (см. формулу (26)), который позволил впервые количественно описать зависимость диэлектрической проницаемости керамики от радиуса ядра R .

Зависимость свойств керамики от размера гранул ранее объяснялась различными причинами: влиянием внутренних напряжений, подвижностью доменных стенок, изменением плотности доменной структуры. В данной работе предложено учитывать все перечисленные факторы не по отдельности, а одновременно, добавив наличие переходного слоя. В первом приближении, в силу малости этих факторов, их можно рассматривать независимо друг от друга.

Поляризация в грануле, как показано в работе, удовлетворяет модифицированному уравнению ГЛ (27), которое отличается от аналогичного уравнения для кристалла наличием формфактора $\hat{\chi}$ и параметрами термодинамического разложения $\hat{a}(R), \hat{b}(R)$. Коэффициент s для керамики и кристалла один и тот же. Это вызвано тем обстоятельством, что деформация при электрострикции пропорциональна квадрату поляризации и не влияет на коэффициенты при более высоких степенях P .

Точно такая же ситуация должна иметь место и для феноменологических параметров свободной энергии ГЛД. Коэффициенты при вторых степенях компонент вектора поляризации изменяются только из-за наличия переходного слоя и упругих свойств ядра. Наличие доменной структуры наиболее сильно влияет на параметры разложения при четвертой степени поляризации, а коэффициенты при более высоких степенях от размера гранулы не зависят.

Зависимости параметров $\hat{a}(R)$, $\hat{b}(R)$ определяются разными физическими причинами. Для коэффициента $\hat{a}$ эта зависимость диктуется упругими свойствами гранулы и наличием переходного слоя. Существование доменных стенок на коэффициент $\hat{a}$ влияния не оказывает из-за наличия свободных зарядов. Наоборот, параметр $\hat{b}$ наиболее сильно зависит от существования доменов. Температурная зависимость деформации приводит к зависимости постоянной Кюри от размера гранул, заметной только при малых R . Более сильный размерный эффект демонстрирует зависимость температуры $T_0(R)$. Зависимость $\hat{a}(R)$ является монотонной, а величина $\hat{b}(R)$ имеет экстремум при $R = s$, который обеспечивает максимум диэлектрической проницаемости при данном размере гранулы.

Учет слагаемых в выражении для свободной энергии (2), связанных с упругим полем, приводит к появлению дополнительных членов в энтропии (33), которые учитывают влияние вторичных эффектов, вызванных взаимодействием электрического и упругого полей. Влияние третичных эффектов является заметным только вблизи доменных границ. Можно показать, что для $R = 0.6$ мкм вклад температурной зависимости энергии доменных стенок в энтропию гранулы составляет порядка 1% от вклада S_{GL} .

Выведенные выражения для параметров термодинамического разложения позволяют определять не только тепловые, но и другие физические характеристики гранулы (спонтанную поляризацию, коэрцитивную силу, гистерезисную кривую, пьезоэлектрические модули) и описывать их зависимость от размера гранулы. Полученные зависимости ЭКЭ для гранул сферической и цилиндрической формы однозначно указывают на сильную зависимость величины изменения температуры от формы гранулы. Наибольшее изменение температуры практически во всем температурном диапазоне достигается для шарообразной гранулы.

Для полного описания свойств керамики, помимо выведенных в работе формул, необходимо знать еще функцию распределения гранул по размерам. Нормальное распределение достаточно точно описывает диэлектрическую проницаемость вблизи температуры фазового перехода и выше этой температуры. При $T < T_0$ точность нормального распределения заметно уменьшается [6, 47]. Увеличение погрешности, на наш взгляд, вызвано зависимостью параметра $\hat{b}$ от наличия доменов, существующих только в сегнетофазе. Кроме того, для точного описания температурной зависимости диэлектри-

ческой проницаемости необходимо уточнение вида распределения гранул по размерам, учитывающего наличие гранул как с тетрагональной, так и с орторомбической фазой.

При нахождении упругих напряжений и поляризации в грануле матрица считалась диэлектрической и ее воздействие на гранулу задавалось давлением p . Это позволяет использовать разработанную в работе теоретическая модель при расчете свойств магнитоэлектрических композитов. В этом случае матрица является магнитострикционным материалом, а давление p возникает вследствие эффекта магнитострикции и разности коэффициентов теплового расширения ядра, слоя и гранулы. Результаты расчетов по формулам настоящей работы ясно показывают наличие сильной зависимости диэлектрической проницаемости и ЭКЭ в грануле сегнетоэлектрической керамики от ее размеров. Разработанная теоретическая модель позволяет описывать эти свойства количественно и может быть использована для оптимизации пьроэлектрического и электрокалорического эффектов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-58-26015).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Starkov, O. Pakhomov, and I. Starkov, *Ferroelectrics* **14**, 108 (2014).
2. G. Suchaneck, O. Pakhomov, and G. Gerlach, *Electrocaloric Cooling*, InTechOpen, London (2017).
3. A. Greco, C. Aprea, A. Maiorino, and C. Masselli, *Int. J. Refrig.* **106**, 66 (2019).
4. Y. V. Sinyavsky and V. M. Brodyansky, *Ferroelectrics* **131**, 321 (1992).
5. B. C. Kim, K. W. Chae, and C. I. Cheon, *J. Korean Phys. Soc.* **76**, 226 (2020).
6. И. А. Старков, А. С. Анохин, И. Л. Мыльников, М. А. Мишнев, А. С. Старков, *ФТТ* **4**, 443 (2022).
7. J. H. Qiu and Q. Jiang, *J. Appl. Phys.* **105**, 034110 (2009).
8. Дж. Най, *Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
9. А. С. Старков, И. А. Старков, *ЖЭТФ* **146**, 297 (2014).

10. А. Л. Холкин, В. А. Трепаков, Г. А. Смоленский, Письма в ЖЭТФ **32**, 103 (1982).
11. Е. П. Смирнова, Г. Ю. Сотникова, Н. В. Зайцева, А. А. Капралов, Г. А. Гаврилов, Письма в ЖТФ **44**, 49 (2018).
12. N. A. Pertsev, A. G. Zembilgotov, and A. K. Tagantsev, Phys. Rev. Lett. **80**, 1988 (1998).
13. M. Vrabelj, H. Uršič, Z. Kutnjak, B. Rožič, S. Drnovšek, A. Benčan, V. Bobnar, L. Fulanovič, and B. Malič, J. Eur. Ceram. Soc. **36**, 75 (2016).
14. T. Hoshina, S. Wada, Y. Kuroiwa, and T. Tsurumi, Appl. Phys. Lett. **93**, 192914 (2008).
15. A. Y. Emelyanov, N. A. Pertsev, S. Hoffmann-Eifert, U. Böttger, and R. Waser, J. Electroceram. **9**, 5 (2002).
16. А. С. Старков, О. В. Пахомов, И. А. Старков, ЖЭТФ **143**, 1144 (2013).
17. B. A. Strukov, S. T. Davitadze, S. G. Shulman, B. V. Goltzman, and V. V. Lemanov, Ferroelectrics **301**, 157 (2004).
18. T. Hoshina, J. Ceram. Soc. Jpn. **121**, 156 (2013).
19. I. A. Starkov and A. S. Starkov, J. Nanophotonics **10**, 033503 (2016).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
21. В. И. Алешин, Кристаллография **36**, 1352 (1991).
22. О. Г. Вендик, Н. Ю. Медведева, С. П. Зубко, Письма в ЖТФ **34**, 13 (2008).
23. A. S. Starkov, I. A. Starkov, A. I. Dedyk, G. Suchaneck, and G. Gerlach, Phys. Stat. Sol. (b) **255**, 1700245 (2018).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
25. А. С. Старков, И. А. Старков, ЖЭТФ **146**, 980 (2014).
26. В. Г. Эдвабник, Современные проблемы науки и образования **1-2**, 76 (2015).
27. Л. А. Апресян, Т. В. Власова, В. И. Красовский, В. И. Крыштоб, С. И. Расмагин, ЖТФ **90**, 1175 (2020).
28. L. D. Landau and E. M. Lifshits, Phys. Z. Sowjetunion **8**, 153 (1935).
29. C. Kittel, Phys. Rev. **70**, 965 (1946).
30. T. Mitsui and J. Furuichi, Phys. Rev. **90**, 193 (1953).
31. A. K. Tagantsev, J. Fousek, and L. E. Cross, *Domains in Ferroic Crystals and Thin Films*, Springer, New-York (2010).
32. G. Arlt, D. Hennings, and G. de With, J. Appl. Phys. **58**, 1619 (1985).
33. A. M. Bratkovsky and A. P. Levanyuk, AIP Conf. Proc. **535**, 218 (2000).
34. Y. Huan, X. Wang, J. Fang, and L. Li, J. Eur. Ceram. Soc. **34**, 1445 (2014).
35. Y. Tan, J. Zhang, Y. Wu, Ch. Wang, V. Koval, B. Shi, H. Ye, R. McKinnon, G. Viola, and H. Yan, Sci. Rep. **5**, 1 (2015).
36. B. Dai, X. Hu, R. Yin, W. Bai, F. Wen, J. Deng, L. Zheng, J. Du, P. Zheng, and H. Qin, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. **28**, 7928 (2017).
37. N. A. Pertsev and A. G. Zembilgotov, J. Appl. Phys. **78**, 6170 (1995).
38. Z. Zhao, V. Buscaglia, M. Viviani, M. T. Buscaglia, L. Mitoseriu, A. Testino, M. Nygren, M. Johnson, and P. Nanni, Phys. Rev. B **70**, 024107 (2004).
39. Y. L. Li, L. E. Cross, and L. Q. Chen, J. Appl. Phys. **98**, 064101 (2005).
40. P. Marton, I. Rychetsky, and J. Hlinka, Phys. Rev. B **81**, 144125 (2010).
41. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials* Oxford Univ. Press, Oxford (1977).
42. V. A. Lukacs, M. Airimioaei, L. Padurariu, L. P. Curecheriu, C. E. Ciomaga, A. Bencan, G. Drazic, M. Avakian, J. L. Jones, G. Stoian, M. Deluca, R. Brunner, A. Rotaru, and L. Mitoseriu, J. Eur. Ceram. Soc. **42**, 2230 (2022).
43. В. И. Смирнов, *Курс высшей математики*, т. 2., Наука, Москва (1974).
44. А. С. Старков, О. В. Пахомов, И. А. Старков, Письма в ЖЭТФ **91**, 556 (2010).
45. G. G. Wiseman and J. K. Kuebler, Phys. Rev. **131**, 2023 (1963).
46. D. L. Shan, C. H. Lei, Y. C. Cai, K. Pan, and Y. Y. Liu, Int. J. Solids Struct. **216**, 59 (2021).
47. R. P. S. M. Lobo, N. D. Mohallem, and R. L. Moreira, J. Amer. Ceram. Soc. **78**, 1343 (1995).

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ДВОЙНОМ МАНГАНИТЕ $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$: МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НА ЗОНДОВЫХ ЯДРАХ ^{57}Fe

В. И. Ниценко ^a, А. В. Соболев ^a, А. А. Белик ^b, Я. С. Глазкова ^{a*}, И. А. Пресняков ^a

^a Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
199991, Москва, Россия

^b International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA),
National Institute for Materials Science (NIMS),
Namiki 1-1, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan

Поступила в редакцию 19 декабря 2022 г.,
после переработки 19 декабря 2022 г. г.
Принята к публикации 21 января 2023 г.

Представлены результаты мессбауэровского исследования электрических сверхтонких взаимодействий зондовых нуклидов ^{57}Fe , локализованных в структуре «двойного» манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$. Измерения проводились в интервале температур $101\text{ K} < T < 447\text{ K}$, в котором данный манганит обладает ненулевой спонтанной электрической поляризацией (P_s), а также включающем температуру $T^* \approx 240\text{ K}$ структурного фазового перехода $P1 \leftrightarrow Im$. Проведен детальный анализ параметров сверхтонких взаимодействий парциальных спектров ядер ^{57}Fe и их кристаллохимическая идентификация определенным позициям ян-теллеровских ионов Mn^{3+} в структуре манганита. В рамках модели «динамических» зарядов Борна предложен алгоритм, позволяющий на основе структурных данных соединения и экспериментальных значений квадрупольных расщеплений $\Delta(T)$ мессбауэровских спектров зондовых атомов ^{57}Fe построить температурную зависимость поляризации $P_s(T)$ кристалла. Полученные по обе стороны от точки T^* зависимости $P_s(T)$ анализировались в рамках модели среднего поля.

DOI: 10.31857/S0044451023050085

EDN: BDXPEX

1. ВВЕДЕНИЕ

Существование для одного соединения намагнитченности (M) и электрической поляризации (P_s) является характерной особенностью так называемых собственных мультиферроиков. Такие соединения можно разделить на мультиферроики первого (M и P_s практически не зависят друг от друга) и второго (сильное взаимное влияние M и P_s) родов [1]. Помимо «традиционных» макроскопических дифракционных и магнитных методов исследования этих важных с точки зрения практического использования соединений все чаще применяются локальные ядерно-резонансные методы диагностики: ЯМР [2–9], ЯКР [10, 11], мюонная спектроскопия [12–14], спектроскопия возмущенных угловых

γ – γ -корреляций (РАС-спектроскопия) [15, 16], а также мессбауэровская диагностика (ЯГР) [17–19]. Экспериментальные температурные зависимости сверхтонких магнитных полей (B_{hf}) и главных компонент (V_{ii}) тензора градиента электрического поля (ГЭП), полученные с помощью этих методов, отражают аналогичные зависимости спонтанных намагнитченности $M(T)$ и электрической поляризации $P_s(T)$ соответственно. Однако, если для нуклидов ^{57}Fe , ^{55}Mn и ^{53}Cr соотношение $B_{hf} = \alpha M$, как правило, имеет линейный характер, то в случае параметров тензора ГЭП зависимости

$$\{V_{ii}\}_{x,y,z} = f(P_s), \quad \eta = f(P_s),$$

где

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}$$

— параметр асимметрии, имеют нетривиальный характер. Для их установления необходимо учитывать специфику электронного и кристаллического строения соединения. В ряде работ использова-

* E-mail: janglaz@bk.ru

лась аппроксимация в виде квадратичных функций $V_{ii} = a + bP_s^2$ и $\eta \propto P_s^2$ [20–22]. Однако подобный подход носит скорее формальный характер и не позволяет воедино связать значения параметров сверхтонких взаимодействий резонансных нуклидов с кристаллографическими данными и физическими характеристиками исследуемых фаз.

В настоящей работе представлены результаты мессбауэровского исследования электрических сверхтонких взаимодействий зондовых ядер ^{57}Fe , введенных в структуру «двойного» перовскитоподобного манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$, который в области температур $T < T_C \approx 460\text{ K}$ демонстрирует спонтанную электрическую поляризацию, а при более низких температурах $T < T_N \approx 59\text{ K}$ переходит в магнитоупорядоченное состояние, демонстрируя мультиферроидные свойства [23]. По сравнению с оксидными перовскитами ABO_3 , в их «двойных» аналогах $(A'A'')\text{B}_4\text{O}_{12}$ катионная подрешетка A «распадается» на две подрешетки, образованные крупными катионами A' с высоким координационным числом ($\text{КЧ} = 8\text{--}12$) и ян-теллеровскими катионами $A'' = \text{Cu}^{2+}$ и Mn^{3+} с псевдоквадратной кислородной координацией [24]. В случае $(\text{BiMn}_3)\text{Mn}_4\text{O}_{12}$ эти подрешетки состоят из катионов $A' = \text{Bi}^{3+}$ и $A'' = \text{Mn}^{3+}$, при этом подрешетка с искаженным октаэдрическим кислородным окружением (B) также образована ян-теллеровскими катионами Mn^{3+} , с которыми непосредственно связаны процессы орбитального упорядочения [25]. Совместное действие катионов Mn^{3+} и Bi^{3+} , последний из которых содержит стереохимически активную неподеленную электронную пару [19, 26, 27], индуцирует для манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ целый каскад структурных фазовых переходов [28], одному из которых ($P1 \leftrightarrow Im, T^* \approx 240\text{ K}$) посвящена настоящая работа.

Согласно результатам ранее проведенных исследований легированных манганитов $\text{AMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ ($A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cd}, \text{Pb}$) [29–31] атомы железа локализуются в их структуре исключительно в формальной степени окисления «+3», замещая катионы марганца только в октаэдрической подрешетке. При этом было показано, в том числе и с привлечением теоретических расчетов, что число парциальных спектров ядер ^{57}Fe , а также их параметры адекватно отражают специфику локальной кристаллографической структуры манганитов. Важно также отметить, что исследования с привлечением «макроскопических» методов диагностики указывают лишь на незначительное влияние зондовых атомов на параметры и характер протека-

ния структурных и магнитных фазовых переходов в этих соединениях. Целью настоящей работы является установление количественной зависимости между параметрами тензора ГЭП мессбауэровских ядер ^{57}Fe в манганите $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ и его спонтанной электрической поляризацией в области $T_N < T < T_C$, включающей точку T^* структурного перехода $P1 \leftrightarrow Im$ [32].

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Синтез манганита $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ проводился в аппарате высокого давления «белт»-типа. Смесь стехиометрических количеств оксидов Mn_2O_3 , Bi_2O_3 и $^{57}\text{Fe}_2\text{O}_3$ запрессовывали в золотую капсулу, которая подвергалась давлению около 6 ГПа с последующим нагревом до 1323 К в течение 10 минут. После выдерживания под высоким давлением в течение 120 мин образец закаливался до комнатной температуры. Более подробное описание методики синтеза манганита висмута можно найти в работе [28].

Данные порошковой дифракции на синхротронном источнике рентгеновского излучения (SXRPD) были получены в температурном диапазоне от 100–450 К в большой камере Дебая–Шеррера на линии BL15XU (SPring-8) в интервале 2θ от 3° до 60° с шагом 0.003° . Использовалось монохроматическое излучение с длиной волны $\lambda = 0.65298\text{ \AA}$. Перед проведением измерений образцы в виде порошков плотно упаковывались в стеклянные капилляры (Lindenmann, внутренний диаметр 0.1 мм). Во время низкотемпературных измерений заполненные образцами капилляры охлаждались в токе N_2 . Интерпретация диффрактограмм и уточнение параметров кристаллической решетки были проведены методом Ритвельда с использованием программы RIETAN-2000 аналогично тому, как было описано в работе [28].

Мессбауэровские спектры измерялись на спектрометре электродинамического типа, работающем в режиме постоянного ускорения. В качестве источника мессбауэровского γ -излучения использовался $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$. Значения изомерных сдвигов приводятся относительно $\alpha\text{-Fe}(298\text{ K})$. Расшифровка экспериментальных мессбауэровских спектров осуществлялась с использованием программного пакета «SpectrRelax» [33]. Расчет параметров тензора ГЭП проводился с помощью программы «GradientNCMS», разработанной в НИЛ ядерно-химического материаловедения химического факультета МГУ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

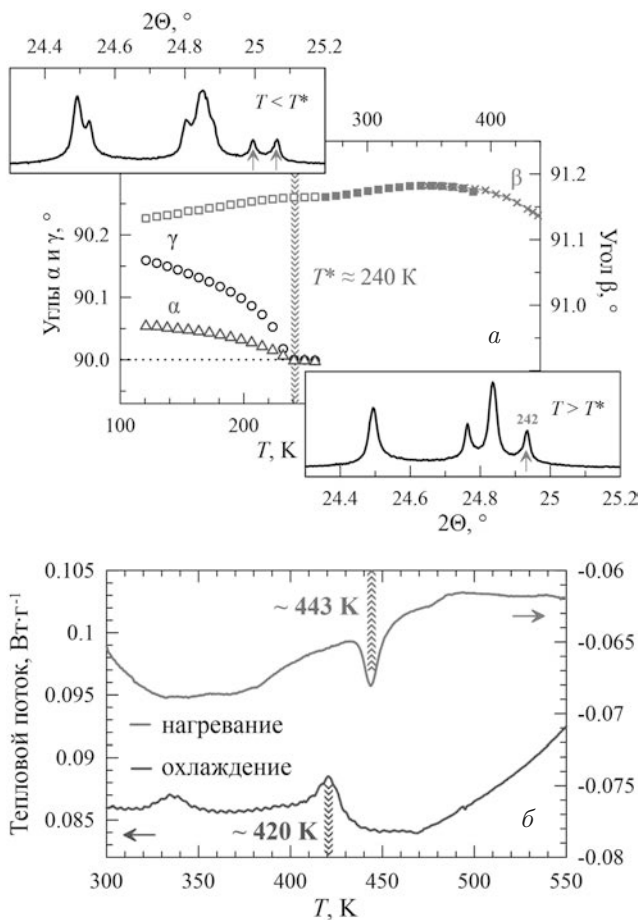


Рис. 1. Температурные зависимости углов (α, β, γ) элементарных ячеек структурных модификаций $P1$ (10–290 K) и Im (250–450 K) манганита $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ (а) и кривых дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), полученных в режимах нагревания и охлаждения (б). Вставки демонстрируют фрагменты дифрактограмм, измеренных в температурных областях $T > T^*$ и $T < T^*$

Рентгеновские дифрактограммы полученного образца показали отсутствие каких-либо дополнительных рефлексов, относящихся к примесным фазам. Измерения при разных температурах демонстрируют сохранение тех же самых кристаллических модификаций, что и у нелегированного железом двойного манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ [28], на что указывает расщепление рефлекса (242) моноклинной фазы при охлаждении образца (рис. 1а, вставки). Аналогично работе [28] температура T^* перехода $P1 \leftrightarrow Im$, не фиксируемая на данных термодинамических исследований, может быть оценена как точка отклонения моноклинных углов α и γ от величины 90° (рис. 1а). Полученное таким образом значение $T^* \approx 240$ K для образца

$\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ заметно ниже соответствующей температуры (~ 290 K) для нелегированного железом манганита. Измерение термограмм образца $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ (рис. 1б) показало наличие фазового перехода в области $T \approx 420$ –440 K, который, согласно литературным данным, отвечает структурному превращению $Im \leftrightarrow I2/m$ [28]. Измерения в режимах охлаждения и нагревания выявили гистерезис шириной около 22 K, что существенно превышает аналогичный параметр для недопированного манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ [28]. Отметим, что ранее проведенные аналогичные измерения для недопированного манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ показали наличие данного перехода примерно при 460 K [28]. Наблюдаемое при легировании манганита смещение температур структурных фазовых переходов косвенно подтверждает локализацию зондовых катионов в объеме исследуемой матрицы, а не выделение их в виде собственной примесной фазы или локализации на поверхности кристаллитов.

Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe в $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$, измеренные в температурном диапазоне $T^* < T < T_C$, представляют собой уширенный симметричный дублет (рис. 2а). Модельная расшифровка подобных спектров, как правило, неоднозначна из-за сильной корреляции параметров составляющих их парциальных компонент. Поэтому на первом этапе анализа было восстановлено распределение $p(\Delta)$ квадрупольных расщеплений Δ , линейно коррелирующих с величинами изомерного сдвига δ [33]. Полученный при этом двумодальный профиль $p(\Delta)$ (рис. 2а) свидетельствует о локализации зондовых ядер ^{57}Fe в двух разных кристаллографических позициях манганита. Этот вывод согласуется с ранее полученными структурными данными для $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ [28], согласно которым в решетке с симметрией Im ян-теллеровские ионы Mn^{3+} образуют два типа позиций Mn1 и Mn2 в искаженном октаэдрическом кислородном окружении (рис. 3а). Поскольку полученное нами среднее значение $\langle \delta \rangle \approx 0.35$ мм/с соответствует высокоспиновому (BC) состоянию Fe^{3+} [34], можно предположить, что зондовые катионы Fe^{3+} изовалентно замещают Mn^{3+} в обеих октаэдрических позициях. Следует также отметить, что катионы Fe^{3+} (BC) обладают сферически-симметричной электронной оболочкой, поэтому наблюдаемое в их спектрах высокое значение $\langle \Delta \rangle \approx 0.62$ мм/с связано с низкой симметрией кислородного окружения замещаемых ими ян-теллеровских ионов Mn^{3+} [28]. Все эти результаты дают основание полагать, что, несмотря на спе-

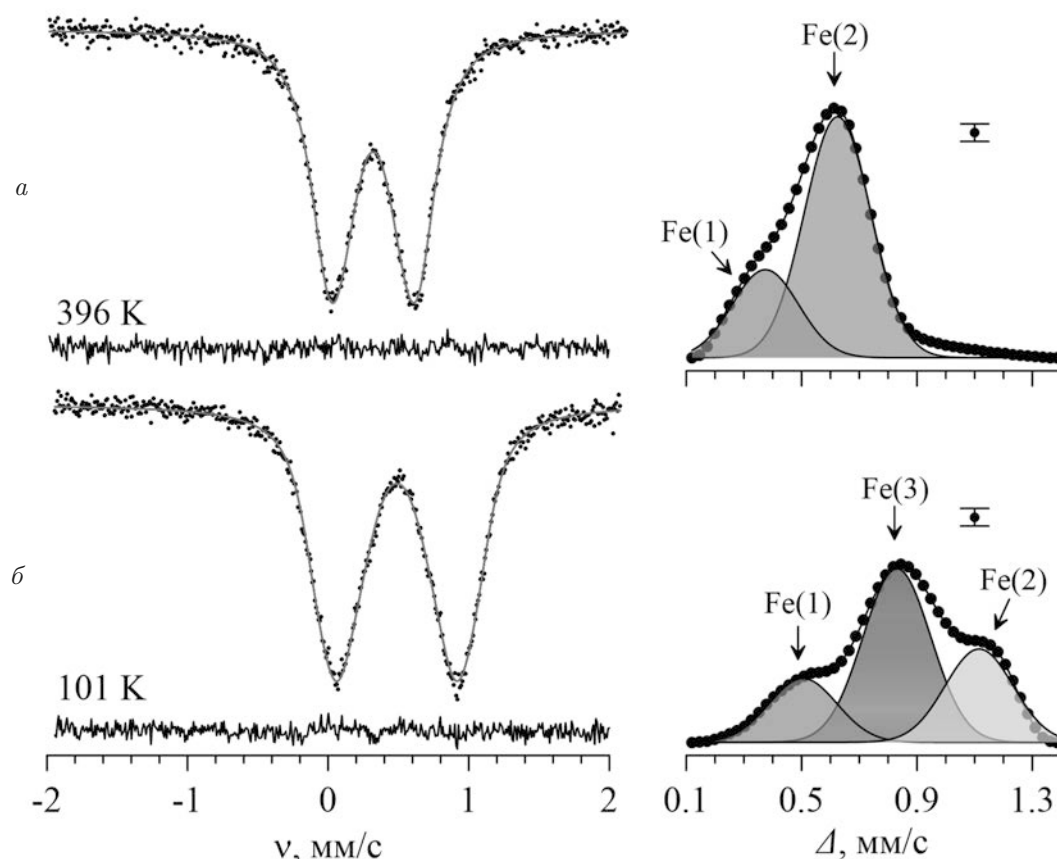


Рис. 2. Характерные мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe в манганите $\text{BiMn}_{6.96}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$, измеренные при $T > T^*$ (а); при $T < T^*$ (б). На правой панели приведены распределения $p(\Delta)$ и их представление в виде суперпозиции нормальных распределений, отвечающих определенным позициям зондовых ядер ^{57}Fe

цифику собственной электронной конфигурации, зондовые катионы Fe^{3+} , замещая в структуре манганита ян-теллеровские катионы Mn^{3+} , сохраняют особенности их локального кристаллического окружения. Возможным объяснением этого может служить кооперативный характер искажения решетки манганита, в том числе и той его составляющей, которая непосредственно связана с эффектом Яна–Теллера.

На основании представленных выше результатов анализа распределения $p(\Delta)$ была реализована модельная расшифровка всей серии спектров, измеренных в диапазоне $T^* < T < T_C$, в виде суперпозиции двух квадрупольных дублетов Fe(1) и Fe(2) с близкими друг к другу значениями сдвигов $\delta_1 \approx \delta_2$ (рис. 4а). Поскольку между параметрами двух дублетов наблюдаются сильные корреляции, нами были наложены дополнительные условия в виде попарного равенства ширин ($\Gamma_1 = \Gamma_2$), а также интенсивностей ($I_1 = I_2$) компонент, так как согласно структурным данным обе позиции Mn1 и Mn2 в манганите $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ (пр. гр. Im) имеют оди-

наковую заселенность [28]. Одним из неожиданных результатов является резкая для обоих парциальных спектров Fe(1) и Fe(2) температурная зависимость их квадрупольных расщеплений (рис. 5). Действительно, как уже было отмечено, для высокоспиновых катионов Fe^{3+} основной вклад в параметры тензора ГЭП обусловлен решеточными суммами (V_{ij}^{lat}), которые связаны исключительно с симметрией кристаллической решетки и поэтому при отсутствии каких-либо структурных превращений не могут вызывать столь сильное изменение квадрупольного расщепления с температурой. Наконец, из-за одинаковой заселенности позиций Mn(i) остается открытым вопрос о соответствии наблюдаемых парциальных спектров Fe(i) определенным позициям манганца. Для ответа на все эти вопросы была предпринята попытка расчета решеточных параметров тензора ГЭП с использованием кристаллографических данных для $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ [28], а также моделирования на основе этих расчетов температурных зависимостей расщеплений $\Delta_i(T)$ для парциальных спектров Fe(1) и Fe(2).

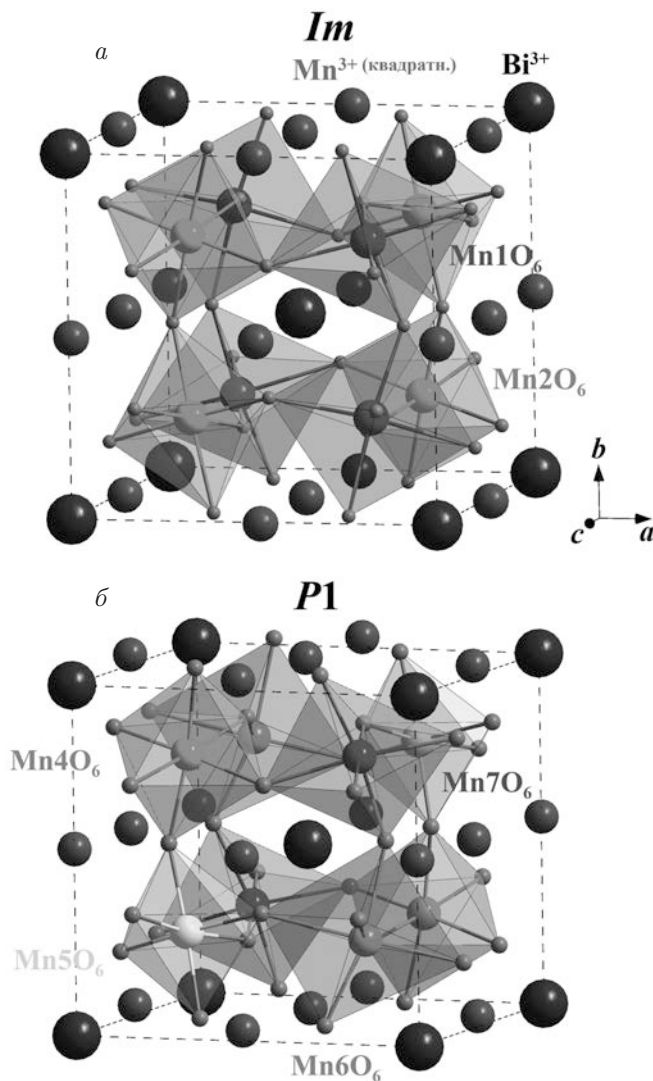


Рис. 3. Псевдокубические ячейки моноклинной (а) и триклинной (б) структурных модификаций «двойного» манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$, воспроизведенных на основе данных [28, 32]. Символами $\text{Mn}(i)$ указаны неэквивалентные кристаллографические позиции ионов Mn^{3+} в подрешетке с октаэдрической кислородной координацией

В рамках ионного приближения, т. е. без учета ковалентности химических связей между анионной и катионной подрешетками, компоненты тензора решеточной части ГЭП на ядрах ^{57}Fe представляют собой сумму монопольного V^{mon} и дипольного V^{dip} вкладов [35]:

$$V_{ij}^{lat} = V_{ij}^{mon} + V_{ij}^{dip} = (1 - \gamma_\infty) \sum_k \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left[\frac{q_k}{r_k} + \frac{r_{ik} p_{ik}}{r_k^3} \right], \quad (1)$$

где γ_∞ — фактор антиэкранирования Штернхеймера; q_k — эффективный заряд k -го иона в решетке;

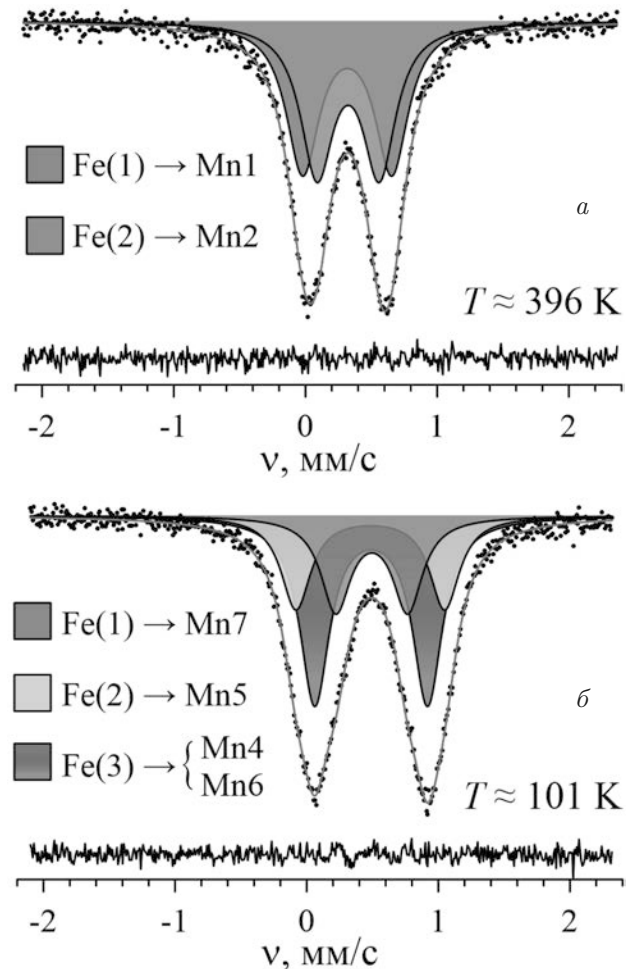


Рис. 4. Примеры модельной расшифровки мессбауэровских спектров на ядрах ^{57}Fe в $\text{BiMn}_{6.96}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$, измеренных по разные стороны от точки структурного перехода $P1 \leftrightarrow Im$ при $T > T^*$ (а) и при $T < T^*$ (б)

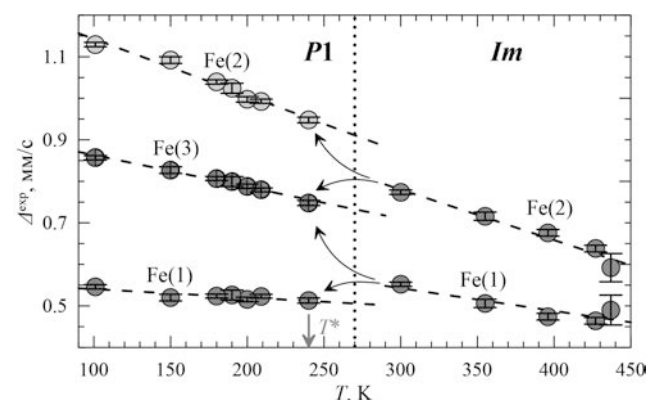


Рис. 5. Температурные зависимости экспериментальных квадрупольных расщеплений $\Delta_i^{exp}(T)$ парциальных спектров $\text{Fe}(i)$ в диапазонах температур устойчивости моноклинной (Im) и триклинной ($P1$) фаз $\text{BiMn}_{6.96}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ (розовой стрелкой обозначена температура T^* , полученная из структурных данных)

Таблица 1. Сверхтонкие параметры мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe в манганите $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ при $T = 101\text{ K}$ и $T = 396\text{ K}$

$T, \text{ K}$	Парциальный спектр	$\delta, \text{ мм/с}$	$\Delta^{exp}, \text{ мм/с}$	$\Gamma, \text{ мм/с}$	$I, \%$
396	$\text{Fe}(1) \rightarrow \text{Mn}1$	0.32(1)	0.47(1)	0.30(1)	50(1)
	$\text{Fe}(2) \rightarrow \text{Mn}2$	0.32(1)	0.68(1)		50(1)
101	$\text{Fe}(1) \rightarrow \text{Mn}7$	0.49(1)	0.55(2)	0.27(1)	25(1)
	$\text{Fe}(2) \rightarrow \text{Mn}5$	0.48(1)	1.11(2)		25(1)
	$\text{Fe}(3) \rightarrow (\text{Mn}4 + \text{Mn}6)$	0.49(1)	0.85(1)		50(1)

r_k — расстояние между k -ым ионом и ядром ^{57}Fe ; r_{ik} — проекция радиус-вектора $\mathbf{r}_k$ на направление i -ой проекции электрического дипольного момента k -го иона p_{ik} (где $i = x, y, z$). Допускалось, что величины дипольных моментов ионов ($\mathbf{p}_k$) и их проекций (p_{ik}) могут быть рассчитаны в рамках модели Борна [36]: $\mathbf{p}_k = Z_k \Delta \mathbf{r}_k$ или $p_{ik} = Z_k \Delta x_{ik}$, где Z_k — заряд Борна k -ого иона, который в наших расчетах считался изотропной скалярной величиной, $\Delta \mathbf{r}_k$ (Δx_{ik}) — вектор смещения k -ого иона (и его i -ая проекция) из его центросимметричной позиции. Расчет величин $\Delta \mathbf{r}_k$ и Δx_{ik} проводился с использованием кристаллографических данных для манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$, полученных при 300 K [28]. Для оценки зарядов Борна нами использовалась процедура, суть которой состояла в последовательном варьировании в выражении (1) зарядов $Z_{\text{Bi}}, Z_{\text{Mn}(i)}, Z_{\text{O}(i)}$ и соответствующих им дипольных моментов p_{ik} при заданных значениях смещений Δx_{ik} до достижения наилучшего согласия с экспериментальными квадратурными расщеплениями Δ_i (табл. 1). На первой стадии этой процедуры искомые борновские заряды Z_k ионов принимались равными их формальным степеням окисления в соединении $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$. В результате были получены значения $Z_{\text{Bi}} = +3.30$, $Z_{\text{Mn}1} \approx Z_{\text{Mn}2} = +3.30$ и $Z_{\text{O}} = -2.20$, которые попадают в диапазон ранее полученных зарядов Борна для соответствующих ионов в других перовскитоподобных оксидах [37]. Используя величины проекций электрических дипольных моментов p_{ik} , можно рассчитать спонтанную поляризацию манганита:

$$P_s = \frac{1}{V} \left(\sum_i \left(\sum_k p_{ik} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2)$$

Полученное нами при $T_0 = 300\text{ K}$ значение $P_s(T_0) \sim 9\text{ мКл/см}^2$ согласуется с ранее полученной величиной порядка 7 мКл/см^2 (при 300 K) для нелегированного ^{57}Fe манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ (пр. гр. Im) [28]. Все эти результаты свидетельствуют о том, что, несмотря на сделанные исходные

допущения, предложенная расчетная схема носит вполне самосогласованный характер и далее может быть распространена на область температур, для которой уже отсутствуют структурные данные.

Полученные для ионов Bi^{3+} , Mn^{3+} и O^{2-} заряды Борна (Z_i) могут быть сопоставлены с эффективными зарядами (S), рассчитанными по модели Брауна с использованием данных о кристаллической структуре незамещенного манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ [28]:

$$S = \sum_k s_k = \sum_k \exp \left(\frac{r_0 - r_k}{B} \right), \quad (3)$$

где r_k — расстояние металл-кислород для k -ой пары $M^{3+}-\text{O}^{2-}$ (где $M = \text{Bi}, \text{Mn}$), r_0 — константа для данного сорта металла: $r_0 = 2.09$ для $\text{Bi}^{3+}-\text{O}^{2-}$ и $r_0 = 1.760$ для $\text{Mn}^{3+}-\text{O}^{2-}$, $B = 0.37$ [38]. С помощью выражения (3) для каждой из двух структурных модификаций $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ были рассчитаны эффективные заряды S ионов Bi^{3+} , Mn^{3+} и O^{2-} , занимающих неэквивалентные кристаллографические позиции.

Таблица 2. Рассчитанные борновские заряды Z и средние эффективные заряды $\langle S \rangle$ ионов в различных структурных модификациях $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$

Структурная модификация	Атом	Z	$\langle S \rangle$
$Im(T > T^*)$	Bi	+3.30	+2.55
	Mn	+3.30	+3.03
	O	-2.20	-1.99
$P1(T < T^*)$	Bi	+4.50	+2.45
	Mn	+4.50	+3.08
	O	-3.00	-2.00

Усредненные для каждого сорта ионов значения зарядов $\langle S_{\text{Bi}} \rangle$, $\langle S_{\text{Mn}} \rangle$ и $\langle S_{\text{O}} \rangle$ представлены в табл. 2. Как этого и следовало ожидать, полученные значения $\langle S \rangle$ очень близки к формальным степеням окисления соответствующих атомов, но имеют более низкие значения, чем их борновские заряды. Высокие

значения зарядов Борна, которые для большинства перовскитоподобных оксидов металлов в несколько раз превышают формальные степени окисления, связаны с деформацией (поляризуемостью) электронной оболочки иона при его смещении из центросимметричной позиции кристалла [36]. Однако в нашем случае расхождение борновских (Z) и эффективных зарядов $\langle S \rangle$ не столь значительно (табл. 2), что косвенно подтверждает обоснованность используемой в настоящей работе ионной модели.

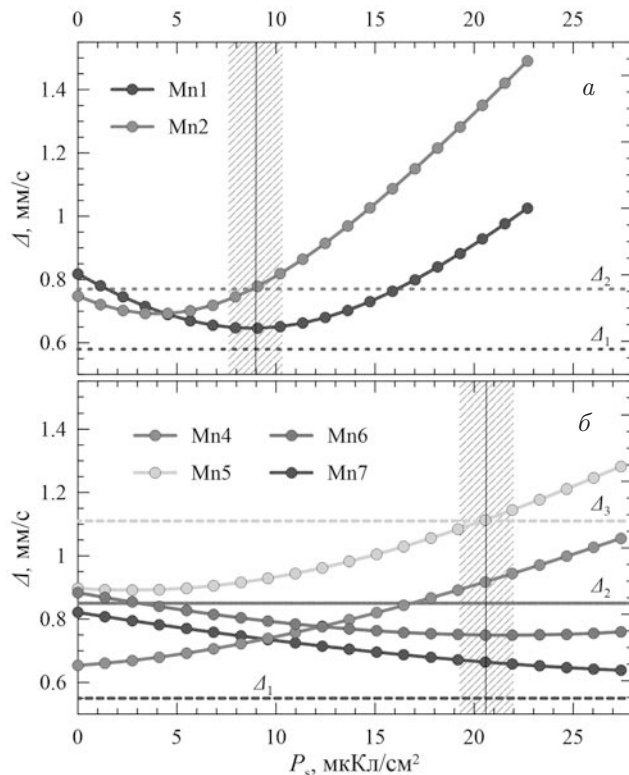


Рис. 6. Зависимости теоретических значений $\Delta_i(P_s)$ от поляризации P_s кристалла при температуре $T = 300$ К (а) и $T = 10$ К (б). Пунктирные прямые соответствуют экспериментальным значениям Δ_i^{exp} по данным мессбауэровской спектроскопии при температурах 300 К (а) и 101 К (б). Заштрихованные области соответствуют оцененным значениям поляризации P_s , при которых теоретические $\Delta_i(P_s)$ и экспериментальные Δ_i^{exp} величины согласуются наилучшим образом

Учет температурной зависимости величин дипольных моментов $p_k(T)$ и связанной с ними спонтанной поляризации $P_s(T)$, которые, по-видимому, являются основной причиной резкого изменения с температурой расщеплений $\Delta_1(T)$ и $\Delta_2(T)$, проводился с помощью приближенных выражений $p_k(T) = \xi_k(T)p_k(T_0)$ и $P_s(T) = \xi_s(T)P_s(T_0)$, в которых $p_k(T_0)$, $P_s(T_0)$ — известные значения соответствующих параметров при данной температуре

$T_0 = 300$ К. Как показали наши предварительные расчеты, для достижения согласия с экспериментом и уменьшения числа варьируемых параметров можно принять одинаковый для всех ионов вид функций $\xi_k(T) \equiv \xi_k(T_0)$:

$$\xi(T) = \frac{p_{Bi}(T)}{p_{Bi}(T_0)} = \frac{p_{Mn(i)}(T)}{p_{Mn(i)}(T_0)} = \frac{p_{O(i)}(T)}{p_{O(i)}(T_0)} = \frac{P_s(T)}{P_s(T_0)}. \quad (4)$$

В рамках сделанных выше приближений можно выписать выражение для величины квадрупольного расщепления мессбауэровского спектра зондового нуклида как функции i -ых проекций $\{P_i\}_{i=x,y,z} = \sum_k p_{ik}$ спонтанной поляризации $P_s = (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)^{1/2}$:

$$\Delta(T) = (1 - \gamma_\infty) \frac{eQ}{2} \times \sum_k \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \left[\frac{q_k}{r_k} + \frac{r_{ik} P_i(T)}{r_k^3} \left(\frac{p_k(T_0)}{P_s(T_0)} \right) \right], \quad (5)$$

где eQ — квадрупольный момент ядра ^{57}Fe в первом возбужденном состоянии; $p_k(T_0)/P_s(T_0)$ — отношение дипольного момента k -го иона к спонтанной поляризации кристалла, которые рассчитывались с использованием кристаллографических данных для $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ (пр. гр. Im) при 300 К. Воспользовавшись уравнением (5), мы построили теоретические зависимости $\Delta_1(P_s)$ и $\Delta_2(P_s)$ (рис. 6а), предполагая, что зондовые катионы $^{57}\text{Fe}^{3+}$ не вносят в структуру манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ существенных искажений. Далее, имея экспериментальные значения квадрупольных расщеплений Δ_1 и Δ_2 при определенной температуре (рис. 5), мы построили температурную зависимость $P_s(T)$, удовлетворяющую с учетом статистических ошибок условиям $\Delta_1(P_s) = \Delta_1(T)$ и $\Delta_2(P_s) = \Delta_2(T)$ (рис. 7).

Описанная выше процедура построения зависимостей $P_s(T)$ по экспериментальным значениям $\Delta_i(T)$ была применена далее для триклинной фазы манганита $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ (пр. гр. $P1$). Для данной структурной модификации распределение $p(\Delta)$ имеет трехмодальный профиль (рис. 2б), что может свидетельствовать о локализации зондовых ионов Fe^{3+} , как минимум, в трех неэквивалентных позициях. Согласно структурным данным [32] в триклинной фазе катионы Mn^{3+} образуют четыре равнозаселенные позиции Mn4, Mn5, Mn6 и Mn7 с октаэдрическим кислородным окружением (рис. 3б). По-видимому, какие-то две из этих позиций име-

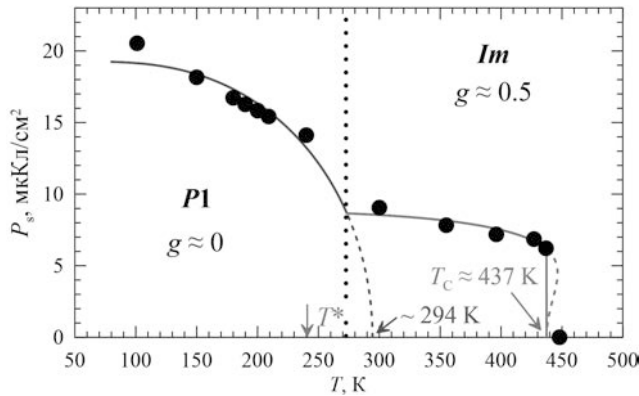


Рис. 7. Температурные зависимости спонтанной поляризации $P_s(T)$ для структурных модификаций манганита $\text{BiMn}_{6.96}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ (розовой стрелкой обозначена температура T^* , полученная из структурных данных)

ют настолько близкое по симметрии кристаллическое окружение, что уже не могут быть неразличимы в мессбауэровских спектрах. Для проверки этого предположения был проведен расчет параметров дисторсии (Δ_d) полиэдров MnO_6 :

$$\Delta_d = \frac{1}{6} \sum_{n=1}^6 \left[\frac{l_n - \frac{1}{6} \left(\sum_{n=1}^6 l_n \right)}{\frac{1}{6} \left(\sum_{n=1}^6 l_n \right)} \right]^2 = \frac{1}{6} \sum_{n=1}^6 \left[\frac{l_n - l_{\text{med}}}{l_{\text{med}}} \right]^2, \quad (6)$$

где l_n — значения длины n -ой связи $\text{Mn}-\text{O}_{(n)}$; l_{med} — среднее значение соответствующих связей в MnO_6 . Рассчитанные с помощью выражения (4) параметры $\Delta_d(\text{Mn4}) = 13.7 \cdot 10^{-4}$, $\Delta_d(\text{Mn5}) = 32.1 \cdot 10^{-4}$, $\Delta_d(\text{Mn6}) = 32.5 \cdot 10^{-4}$ и $\Delta_d(\text{Mn7}) = 14.3 \cdot 10^{-4}$ условно можно объединить в две близких по величинам группы, при этом в одной группе оказываются позиции Mn5 и Mn6, а в другой — позиции Mn4 и Mn7. По-видимому, эти группы позиций демонстрируют динамику взаимопревращения с октаэдрическими позициями марганца $\text{Mn}(i)$ при более высоких температурах: позиция Mn1 «распадается» на позиции Mn4 и Mn7, в то же время позиция Mn2 — на позиции Mn5 и Mn6. Стоит отметить, что наблюдаемые величины параметров дисторсии не позволяют объяснить наблюдаемого профиля распределения квадрупольного расщепления $p(\Delta)$ в данном температурном диапазоне. Действительно, все наши попытки обработать спектры в виде суперпозиции четырех парциальных компонент приводили к очень неустойчивому решению с сильно коррелирующими друг с другом параметрами.

В то же время аппроксимация спектров в виде суперпозиции двух парциальных квадрупольных дублетов, согласно полученным результатам расчетов параметров дисторсии, приводит к неудовлетворительным результатам. В результате, спектры, измеренные при $T_N < T < T^*$, были представлены в виде суперпозиции трех парциальных квадрупольных дублетов Fe(1), Fe(2) и Fe(3), при этом интенсивность Fe(3) ровно в два раза превышает интенсивность компонент Fe(1) и Fe(2) (рис. 4б). Используя известные структурные данные для триклинной фазы $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$ при 10 K [32], а также применяя описанный выше алгоритм расчета решеточных вкладов в параметры ГЭП на ядрах ^{57}Fe , для каждой из четырех позиций марганца мы построили теоретические зависимости $\Delta_i(P_s)$ (рис. 6). Как уже обсуждалось, использование подобных зависимостей совместно с экспериментальными значениями Δ_i в исследуемом диапазоне температур позволило смоделировать зависимость $P_s(T)$ (рис. 7).

Помимо информации о спонтанной поляризации, на основании расчетов параметров тензора ГЭП было проведено соотнесение парциальных спектров Fe(i) соответствующим позициям Mn(i) в октаэдрической подрешетке. Показано, что в области температур $T^* < T \approx 447\text{ K}$ дублету Fe(1) с наименьшим значением Δ_1 (рис. 4а) соответствует позиция Mn1, которая в низкотемпературной области $T_N < T < T^*$ «распадается» на позиции Mn6 и Mn7, проявляющиеся в спектрах в виде неразрешенного дублета Fe(3) и дублета Fe(1) (рис. 4б). В то же время, позиция Mn2 «расщепляется» при понижении температуры на позиции Mn4 и Mn5, что проявляется в мессбауэровском спектре в виде неразрешенного дублета Fe(3) и дублета Fe(2) (рис. 4б).

При описании полученных для двух интервалов температур зависимостей $P_s(T)$ нами была использована модель среднего эффективного поля [39]. В рамках данного подхода предполагается, что на каждый ион в кристалле сегнетоэлектрика действует эффективное электрическое поле (E_{eff}), величина которого может быть представлена в виде ряда

$$E_{\text{eff}} = E_0 + \beta P_s + \gamma P_s^3 + \delta P_s^5 + \dots, \quad (7)$$

где E_0 — внешнее электрическое поле, β , γ и δ — коэффициенты в слагаемых, отвечающих дипольному, квадрупольному и октупольному взаимодействиям соответственно. В наших расчетах принималось, что $E_0 = 0$, а также учитывались только дипольные и квадрупольные взаимодействия, последнее из которых (γ) позволяет в рамках единого подхода описывать фазовые переходы как первого, так и второго

рода. Согласно статистической механике, температурная зависимость поляризации может быть представлена в общем виде [39]:

$$P_s(T) = P_0 \operatorname{th} \left(\frac{E_{\text{eff}} P_0 N^{-1}}{k_B T} \right) = P_0 \operatorname{th} \left(\frac{(\beta P_s + \gamma P_s^3) P_0 N^{-1}}{k_B T} \right), \quad (8)$$

где P_0 — спонтанная поляризация насыщения, N — число элементарных диполей на единицу объема кристалла. Воспользовавшись соотношением

$$k_B T_C = \frac{\beta P_0^2}{N}$$

(где T_C — точка Кюри), а также вводя обозначения нормированных величин

$$\sigma_s \equiv \frac{P_s}{P_0}, \quad \tau \equiv \frac{T}{T_C}, \quad g \equiv \frac{\gamma P_0^2}{\beta},$$

можно получить удобное для анализа экспериментальных данных выражение

$$\sigma_s(T) = \operatorname{th} \left(\frac{\sigma_s(T) + g \sigma_s^3(T)}{\tau} \right), \quad (9)$$

где значение параметра g является количественным критерием природы (рода) перехода в ферроэлектрическое состояние кристалла [39]. Обработка экспериментальных зависимостей $P_s(T)$ с использованием выражения (9) представлена на рис. 7. Полученное значение параметра $g \approx 0.48(3)$ в области температур интервала $T^* < T < T_C$ указывает на значительный вклад квадрупольных взаимодействий ($\gamma \neq 0$ в выражении (8)), что, в свою очередь, является характерной особенностью фазовых переходов первого рода [39, 40]. Подобное поведение наблюдалось для многих оксидных систем, в частности, проявляющих мультиферроидные свойства [41]. Определенная в рамках данного подхода к описанию $P_s(T)$ точка перехода в ферроэлектрическое состояние $T_C \approx 437$ К лишь незначительно отличается от температуры ($T_t \approx 447$ К) структурного перехода $Im \leftrightarrow I2/m$, определенной для образца $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$ из термодинамических данных (рис. 1б). При переходе же в область $T_N < T < T^*$ зависимость $P_s(T)$ не только претерпевает излом в точке T^* , но и описывается выражением (8) с параметром $g \approx 0$, что при экстраполяции к температуре ~ 294 К (см. рис. 7) должно соответствовать

«плавному» фазовому переходу второго рода [39]. Обсуждение природы полученного нами нетривиального характера зависимостей $P_s(T)$ хоть и выходит за рамки целей настоящей работы, но в дальнейшем должно стимулировать привлечение для исследования данного необычного соединения независимых локальных и макроскопических экспериментальных методов, а также теоретических подходов.

4. ВЫВОДЫ

С помощью мессбауэровской спектроскопии на ядрах зондовых атомов ^{57}Fe исследована взаимосвязь локальной кристаллической структуры и процессов спонтанной электрической поляризации в манганите $\text{BiMn}_7\text{O}_{12}$. Показано, что зондовые катионы Fe^{3+} статистически замещают изовалентные им катионы Mn^{3+} в позициях с октаэдрическим кислородным окружением. Параметры электрических сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe отражают симметрию кристаллического окружения катионов Mn^{3+} в этих позициях. Расчеты параметров тензора ГЭП с учетом монополярных и дипольных вкладов позволили оценить дипольные моменты, вызванные смещением ионов Bi^{3+} , Mn^{3+} , O^{2-} в моноклинной и триклинной структурных модификациях манганита $\text{BiMn}_{6.94}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_{12}$. В рамках модели Борна были рассчитаны динамические заряды ионов, значения которых свидетельствуют о незначительной поляризации всех ионов и преобладании ионного вклада в спонтанную электрическую поляризацию кристалла. Показано, что наблюдаемая резкая зависимость квадрупольных расщеплений $\Delta_i(T)$ парциальных спектров $\text{Fe}(i)$ связана с температурной зависимостью $P_s(T)$. Установлено, что по разные стороны от точки $T^* \approx 240$ К фазового перехода $P1 \leftrightarrow Im$ зависимости $P_s(T)$ имеют существенно разный характер. В области $T^* < T < T_C$ полученная зависимость $P_s(T)$ свидетельствует о фазовом переходе сегнетоэлектрик — параэлектрик первого рода. Полученная из мессбауэровских данных температура Кюри $T_C \approx 437$ К близка к температуре структурного перехода $Im \leftrightarrow I2/m$. Предложенный нами алгоритм поиска взаимосвязи экспериментальных зависимостей $\Delta_i(T)$ для зондовых нуклидов ^{57}Fe и поляризуемости $P_s(T)$ кристалла может быть применен для других систем с сегнетоэлектрическими или мультиферроидными свойствами.

Финансирование. Авторы выражают благодарность Российскому Научному Фонду (РНФ, грант № 19-73-10034П) за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Khomskii, *Physics* **2**, 20 (2009).
2. K. Kouřil, V. Chlan, H. Štěpánková et al., *Acta Phys. Pol. A* **127**(2), 234 (2015).
3. Yu. N. Ivanov, A. A. Sokhovskii, and N. V. Volkov, *J. Struct. Chem.* **54**, S130 (2013).
4. A. G. Smol'nikov, V. V. Ogloblichev, S. V. Verkhovskii et al., *JETP Lett.* **102**, 674 (2015).
5. M. Prinz-Zwick, T. Gimpel, K. Geirhos et al., *Phys. Rev. B* **105**, 014301 (2022).
6. A. G. Smol'nikov, V. V. Ogloblichev, A. Yu. Germov et al., *JETP Lett.* **107**(2), 134 (2018).
7. A. V. Zalesky, A. A. Frolov, T. A. Khimich et al., *Europhys. Lett.* **50**(4), 547 (2000).
8. S.-H. Baek, A. P. Reyes, M. J. R. Hoch et al., *Phys. Rev. B* **74**, 140410(R) (2006).
9. E. Jo, S. Park, J. Lee et al., *Sci. Rep.* **7**, 2178 (2017).
10. A. G. Smol'nikov, V. V. Ogloblicheva, S. V. Verkhovskii et al., *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 134 (2017).
11. M. Pregelj, P. Jeglič, A. Zorko et al., *Phys. Rev. B* **87**, 144408 (2013).
12. G. M. Kalvius, F. J. Litterst, O. Hartmann et al., *J. Phys. Conf. Ser.* **551**, 012014 (2014).
13. P. J. Baker, H. J. Lewtas, S. J. Blundell et al., *Phys. Rev. B* **81**, 214403 (2010).
14. H. J. Lewtas, T. Lancaster, P. J. Baker et al., *Phys. Rev. B* **81**, 014402 (2010).
15. G. N. P. Oliveira, R. C. Teixeira, R. P. Moreira et al., *Sci. Rep.* **10**, 4686 (2020).
16. A. M. L. Lopes, G. N. P. Oliveira, and T. M. Mendonça, *Phys. Rev. B* **84**, 014434 (2011).
17. A. Sobolev, V. Rusakov, A. Moskvina et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 275803 (2017).
18. A. B. Соболев, И. А. Пресняков, В. С. Русаков и др., *ЖЭТФ* **151**, 1104 (2017).
19. A. V. Sobolev, V. S. Rusakov, A. M. Gapochka et al., *Phys. Rev. B* **101**, 224409 (2020).
20. S. S. M. Santos, M. L. Marcondes, I. P. Miranda et al., *J. Mater. Chem. C* **9**, 7005 (2021).
21. T. T. Dang, J. Schell, A. G. Boa et al., *Phys. Rev. B* **106**, 054416 (2022).
22. Y. Yeshurun, S. Havlin, and Y. Schlesinger, *Solid State Commun.* **27**, 181 (1978).
23. A. Gauzzi, G. Rousse, F. Mezzandri et al., *J. Appl. Phys.* **113**, 043920 (2013).
24. I. Yamada, *Sci. Technol. Adv. Mat.* **18**, 541 (2017).
25. С. В. Стрельцов, Д. И. Хомский, *УФН* **187**, 1205 (2017).
26. А. В. Соболев, А. В. Боков, В. И и др., *ЖЭТФ* **156**, 972 (2019).
27. D. I. Khomskii, *Transition metal compounds*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2014).
28. A. A. Belik, Y. Matsushita, Y. Kumagai et al., *Inorg. Chem.* **56**, 12272 (2017).
29. I. A. Presniakov, V. S. Rusakov, T. V. Gubaidulina et al., *Phys. Rev. B* **76**, 214407 (2007).
30. Y. S. Glazkova, N. Terada, Y. Matsushita et al., *Inorg. Chem.* **54**, 9081 (2015).
31. A. A. Belik, Y. S. Glazkova, Y. Katsuya et al., *Phys. Chem. C* **120**, 8278 (2016).
32. W. A. Slawinski, H. Okamoto, and H. Fjellwag, *Acta Cryst.* **73**, 313 (2017).
33. M. E. Matsnev and V. S. Rusakov, *AIP Conf. Proc.* **1489**, 178 (2012).
34. D. P. E. Dickson and F. J. Berry, *Mössbauer Spectroscopy*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1986).
35. Z. M. Stadnik, *J. Phys. Chem. Solids* **45**, 311 (1984).
36. Ph. Ghosez, J.-P. Michenaud, and X. Gonze, *Phys. Rev. B* **58**, 6224 (1998).
37. R. D. Shannon and R. X. Fischer, *Phys. Rev. B* **73**, 235111 (2006).
38. N. E. Brese and M. O'Keeffe, *Acta Cryst. B* **47**, 192 (1991).
39. C. L. Wang, J. C. Li, M. L. Zhao et al., *Physica A* **387**, 115 (2008).
40. C. L. Wang, Z. K. Qin, and D. L. Lin, *Phys. Rev. B* **40**(1), 680 (1989).
41. D. C. Arnold, K. S. Knight, F. D. Morrison, and P. Lightfoot, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 027602 (2009).

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ MnBi_2Te_4

Т. П. Макарова*, А. М. Шижин, А. В. Ерыженков, А. В. Тарасов

Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 18 ноября 2022 г.,
после переработки 9 января 2023 г.
Принята к публикации 16 января 2023 г.

Экспериментальные исследования электронной структуры антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 показывают, что величина энергетической запрещенной зоны для различных образцов кристалла может варьироваться в широком энергетическом диапазоне. В связи с тем, что величина запрещенной зоны является одним из ключевых параметров при использовании данной системы для разработки новых функциональных электронных устройств, вопросы о причинах вариации запрещенной зоны в точке Дирака для MnBi_2Te_4 и ее связи с магнитными взаимодействиями являются весьма важными и требуют всестороннего анализа. С целью выявления факторов, влияющих на величину запрещенной зоны, в данной работе проведен анализ изменений электронной структуры исследуемого топологического изолятора при вариации величины поверхностного ван-дер-ваальсова промежутка. Результаты расчетов показали, что при подобных структурных модификациях значение запрещенной зоны может меняться в широком диапазоне от 80–88 мэВ до 4–5 мэВ, что объясняется сильным пространственным перераспределением топологических поверхностных состояний между семислойными блоками MnBi_2Te_4 , имеющими противоположные направления магнитных моментов Mn. Полученные результаты позволяют предположить, что основным параметром, определяющим величину запрещенной зоны, является пространственная локализация топологических поверхностных состояний, на которую могут сильно влиять структурные изменения, происходящие на поверхности кристалла.

DOI: 10.31857/S0044451023050097
EDN: BENYOQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в физике конденсированных сред повышенный интерес привлекает к себе детальный анализ электронной и спиновой структур, а также магнитных и электронных транспортных свойств магнитных топологических изоляторов (ТИ). Благодаря уникальной комбинации топологии и магнетизма эти материалы характеризуются новыми нетривиальными квантовыми эффектами, потенциально интересными для практических приложений. Наиболее впечатляющим проявлением таких эффектов является квантовый аномальный эффект Холла, основанный на квантовании холловской проводимости [1–5]. Благодаря нетривиальным топологическим свойствам магнитные ТИ являются чрез-

вычайно перспективными материалами для применения в современной нанoeлектронике и развивающейся двумерной [6–8] и антиферромагнитной [9–11] спинтронике.

Широкое изучение этих эффектов началось с открытия ТИ, легированных магнитными примесями [1–5, 12–17]. Магнитные примеси в ТИ нарушают симметрию обращения времени, что приводит к открытию энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в структуре топологических поверхностных состояний (ТПС) в точке Дирака [15–20]. В последние годы значительные усилия были направлены на изучение собственных магнитных ТИ, в которых магнитные атомы встроены непосредственно в структуру магнитного ТИ. Это обеспечивает упорядоченное расположение магнитных атомов внутри кристаллической решетки и позволяет значительно увеличить концентрацию магнитных атомов, а также величину ЭЗЗ в точке Дирака.

* E-mail: i@tmakarova.ru

Одним из таких собственных магнитных ТИ является антиферромагнитный (АФМ) ТИ со стехиометрией MnBi_2Te_4 [21–26], который, согласно теоретическим оценкам, характеризуется величиной ЭЗЗ порядка 88 мэВ [21]. Кроме того, для этого материала была показана возможность реализации квантового эффекта Холла как теоретически [27, 28], так и экспериментально [12, 28, 29], а для тонких слоев MnBi_2Te_4 недавно был реализован квантовый аномальный эффект Холла [12, 30]. Перечисленные выше факты значительно повышают прикладной интерес к изучению электронных и магнитных свойств этого материала.

Атомная структура АФМ ТИ MnBi_2Te_4 представляет собой упорядоченный вдоль оси c ряд семислойных блоков (СБ), которые состоят из пяти-слойных блоков Bi_2Te_3 с внедренным в них упорядоченным магнитным бислоем MnTe [21, 22]. Таким образом, АФМ ТИ MnBi_2Te_4 — это слоистое соединение, состоящее из последовательных СБ $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, разделенных между собой ван-дер-ваальсовыми (вдВ) промежутками. Внутри каждого СБ атомы Mn связаны ферромагнитным (ФМ) взаимодействием. Вместе с тем взаимодействие магнитных атомов Mn, расположенных в соседних СБ, носит АФМ-характер [21, 22].

Согласно теоретическим оценкам, величина ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 должна составлять 80–88 мэВ [21, 22, 31]. Однако экспериментальные исследования показывают, что величина ЭЗЗ варьируется в широком диапазоне, в основном от 50–70 мэВ до 12–15 мэВ и даже меньше [21, 25, 31–34]. Более того, в литературе появился ряд работ [35–39], в которых методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением была показана возможность бесщелевой дисперсии ТПС. В то же время последние работы [31, 33, 34] показывают, что величина ЭЗЗ может значительно изменяться для различных образцов в зависимости от энергии фотонов и других факторов, таких как дефектность образцов, локальное изменение стехиометрии, модификация поверхностного магнитного упорядочения и т. д.

Для объяснения этих различий был выдвинут ряд идей. В частности, в ряде работ «отсутствие» ЭЗЗ в точке Дирака связывалось с модификацией магнитного порядка в поверхностном слое [35, 40]. В таком случае, согласно теоретическому моделированию [35], предполагается, что формирование бесщелевой дисперсии может происходить за счет магнитной перестройки поверхности, что приводит к эффективному уменьшению z -компоненты магнит-

ного момента, направленной перпендикулярно поверхности [35].

В то же время теоретические расчеты [33] показывают, что величина ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 также может изменяться из-за поверхностной релаксации вдВ-расстояний между первым и вторым СБ [33]. Смещение локализации ТПС в сторону второго СБ, который характеризуется противоположной ориентацией магнитных моментов Mn, может привести к компенсации эффективного магнитного момента (направленного перпендикулярно плоскости) в области локализации ТПС и соответствующему уменьшению ЭЗЗ. Аналогично изменение величины ЭЗЗ может происходить из-за наличия поверхностных дефектов различной концентрации [31, 34, 41, 42], включая возможную адсорбцию молекул остаточного газа, что может вызывать изменения в локализации ТПС, приводящие к модуляции ЭЗЗ [31, 34].

Из сказанного выше следует, что вопросы о причинах вариации ЭЗЗ в точке Дирака в MnBi_2Te_4 и ее связи с магнитными взаимодействиями остаются открытыми и требуют дальнейшего анализа. Важно отметить, что для решения проблемы высокотемпературного квантового аномального эффекта Холла необходимо исследовать образцы с большой ЭЗЗ в точке Дирака [12, 21, 28–30]. В свою очередь, образцы с малой величиной ЭЗЗ в точке Дирака, скорее всего, соответствуют точке топологического фазового перехода. Поэтому требуется выявить факторы, влияющие на реализацию в АФМ ТИ MnBi_2Te_4 как большой, так и малой ЭЗЗ, которая открывается в структуре ТПС в точке Дирака.

Данная работа посвящена исследованию модуляции ЭЗЗ в точке Дирака при изменении структурных параметров элементарной ячейки, включая варьирование вдВ-интервала между первым и вторым СБ. При этом будут проанализированы изменения в электронной структуре ТПС и ближайших состояниях зоны проводимости и валентной зоны в MnBi_2Te_4 , включая соответствующие изменения в распределении ТПС.

2. ВЛИЯНИЕ ВДВ-ПРОМЕЖУТКА НА ВЕЛИЧИНУ ЭЗЗ

В данной работе анализировались два типа структуры элементарной ячейки поверхности MnBi_2Te_4 , показанных на рис. 1. Первая из них представляет собой элементарную ячейку, использованную в работе [21], в которой впервые был представлен теоретический расчет электронной структуры MnBi_2Te_4 . Параметры данной ячей-

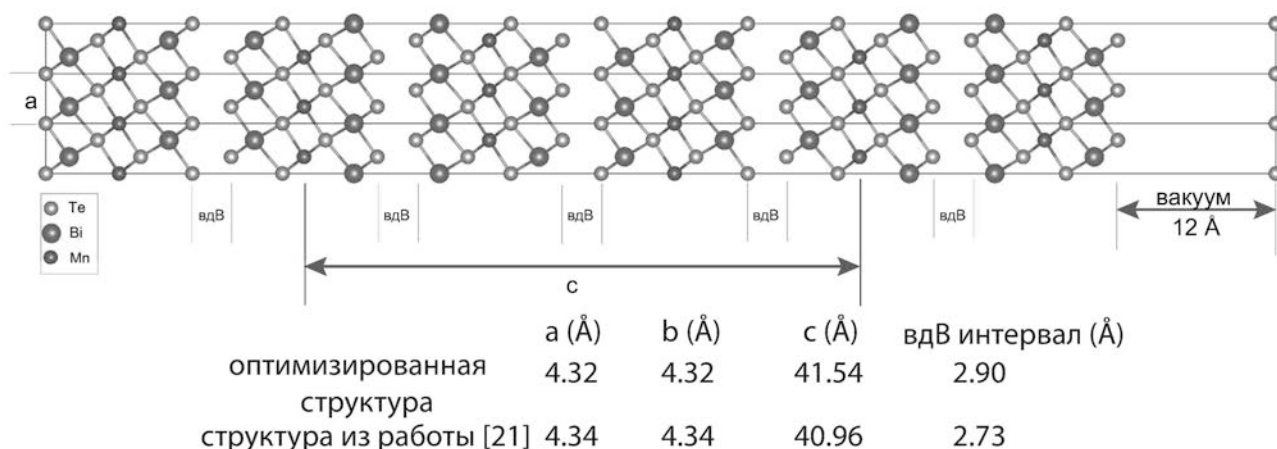


Рис. 1. Структура ячейки, использованная в расчетах. Представлены параметры кристаллической решетки и поверхностного вdB-интервала как для оптимизированной структуры, так и для структуры, взятой из работы [21]

ки соответствуют экспериментальным данным рентгеновской дифракции и наиболее часто используются в теоретических расчетах данной системы. Тем не менее нами было обнаружено, что данная структура не обладает абсолютным минимумом энергии и даже небольшое изменение структурных параметров может привести к ее заметному понижению. По этой причине мы осуществили подбор таких параметров ячейки, которые обеспечивали бы более устойчивое энергетическое положение изучаемой системы. Кроме того, помимо изменения параметров элементарной ячейки была подобрана оптимальная величина вdB-промежутка между всеми СБ. Полученные в результате такой процедуры структурные параметры в сравнении с параметрами ячейки из работы [21] показаны в таблице на рис. 1. При этом нами было проверено, что проведение расчетов методом DFT-D3 [43], учитывающих поправку для вdB-взаимодействий, не приводит к заметным изменениям полной энергии и зонного спектра изучаемой системы. По этой причине мы не использовали данную поправку в процедуре структурной оптимизации элементарной ячейки MnBi_2Te_4 .

Расчеты электронной структуры для обеих элементарных ячеек, результаты которых представлены на рис. 2, показали, что оптимизированная ячейка приводит к более выраженной конусоподобной форме нижней части состояний конуса Дирака (рис. 2б) по сравнению с ячейкой, представленной в работе [21], а также меньшей величине ЭЗЗ в точке Дирака. При этом стоит отметить, что электронная структура неоптимизированной ячейки (рис. 2е) совпадает с результатами расчетов, которые были проведены в работах [21, 31, 33, 34].

Известно, что релаксация поверхности может привести к изменению поверхностного вdB-интервала между первым и вторым СБ [21, 33, 34], например, в результате скола при подготовке чистой поверхности или других внешних воздействий. В настоящей работе для изучения влияния таких структурных изменений на электронную структуру ТПС (в особенности на величину ЭЗЗ в точке Дирака), а также других состояний валентной зоны и зоны проводимости были проведены расчеты для различных значений поверхностного вdB-интервала между первым и вторым СБ (измененного на относительную величину Δd , %). На рис. 2а–д показаны изменения электронной структуры при варьировании поверхностного вdB-интервала относительно его значения в объеме (обозначенного как 0 %) как при уменьшении (до -6%), так и при увеличении (до $+8\%$).

Сравнивая экспериментально измеренные дисперсии электронных состояний в работах [22, 23, 32–34] с результатами наших расчетов, стоит отметить, что электронная структура на рис. 2б, рассчитанная для системы с поверхностным вdB-интервалом, сжатым на -3.46% , и значением ЭЗЗ в точке Дирака, равным 58 мэВ, наиболее согласуется с экспериментальными дисперсиями для случая большой величины ЭЗЗ. Когда поверхностный вdB-интервал сжимается на -6% (при сохранении объемного вdB-интервала), рассчитанное значение ЭЗЗ увеличивается до 77 мэВ (рис. 2а), что близко к значению, рассчитанному в работах [21, 31, 33, 34]. По мере расширения поверхностного вdB-интервала величина ЭЗЗ, наоборот, уменьшается до минимального значения около 5 мэВ при увеличении поверхностного вdB-интервала на $+3.46\%$ (рис. 2г), а затем снова увеличивается до 20 мэВ при дальнейшем расширении этого

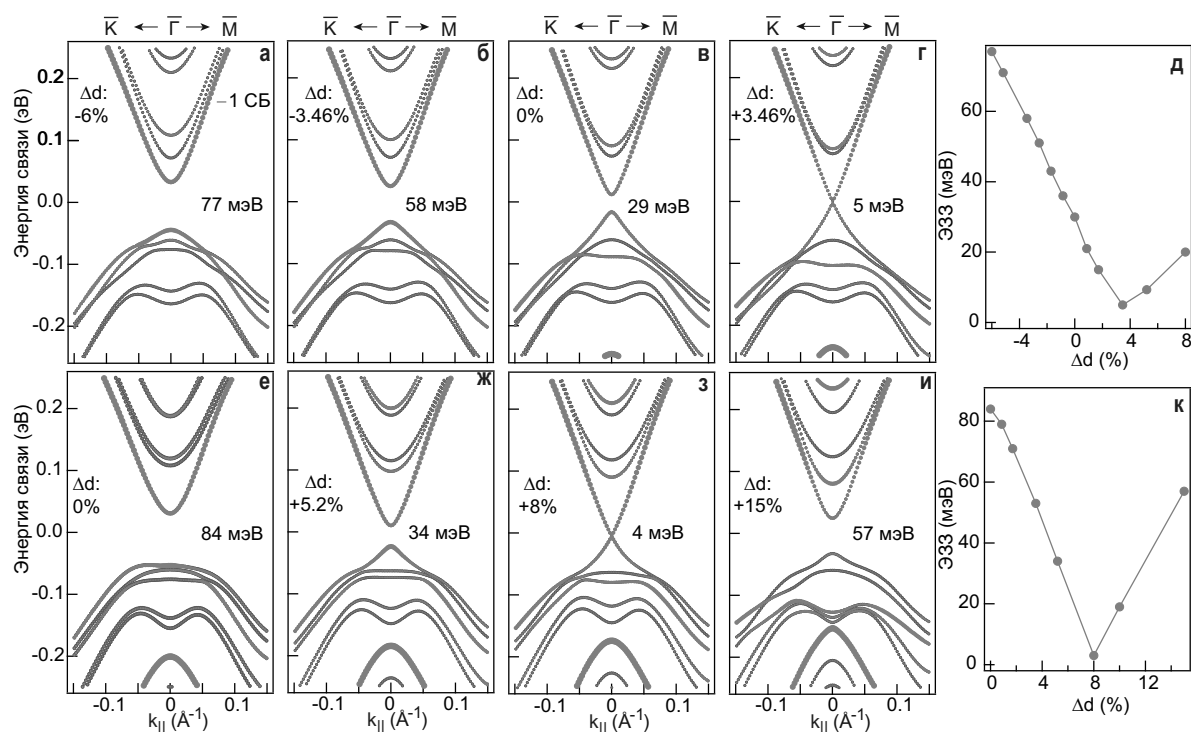


Рис. 2. (В цвете онлайн) *a–г, e–и*) Расчеты электронной структуры ТПС, а также состояний валентной зоны и зоны проводимости для различных значений вДВ-промежутка между первым и вторым СБ (Δd , %). Красными символами показаны состояния, локализованные в первом СБ. *д, к*) Зависимость величины ЭЗЗ в точке Дирака от относительного изменения вДВ-расстояния между первым и вторым СБ (Δd , %). Верхняя панель соответствует расчетам оптимизированной ячейки, нижняя панель — расчетам для структуры, взятой из работы [21]

интервала до +8 %.

Полная рассчитанная зависимость величины ЭЗЗ в точке Дирака от значения поверхностного вДВ-интервала показана на рис. 2*д*. Отметим, что аналогичное поведение величины ЭЗЗ в точке Дирака при изменении поверхностного вДВ-интервала было представлено в работе [33], только со слегка смещенным положением минимума ЭЗЗ. Помимо дисперсий ТПС на рис. 2*а–г* также показаны краевые состояния валентной зоны и зоны проводимости.

Чтобы выделить вклады атомов, принадлежащих поверхностному СБ, на дисперсионных зависимостях электронных состояний, представленных на рис. 2*а–г*, были использованы символы красного цвета с размером, зависящим от величины локализации каждого электронного состояния в первом СБ. При этом становится видно, что для систем с большой ЭЗЗ ТПС локализованы в основном в области первого СБ. Таким образом, из рис. 2*а–г* следует, что с увеличением поверхностного вДВ-интервала локализация ТПС смещается в сторону нижележащих СБ, что будет более подробно исследовано в следующей части работы.

В дополнение к расчетам оптимизированной структуры на рис. 2*е–и* представлены дисперсии электронных состояний, смоделированные для структуры, взятой из работы [21], при изменении поверхностного вДВ-промежутка от 0 до 15 %. В этом случае величина $\Delta d = 0\%$, относительно которой изменялся поверхностный вДВ-промежуток, соответствует значению $2.73 \text{ \AA}$. На рис. 2*е* показана электронная структура при $\Delta d = 0\%$, в этом случае величина ЭЗЗ составляет 84 мэВ, что очень близко к значению, полученному для данной структуры в работе [21].

По сравнению с рассмотренными ранее дисперсиями в случае оптимизированной структуры ячейки, конус Дирака для расчета с параметрами, взятыми из работы [21], характеризуется более платообразной формой нижней части конуса. При увеличении значения Δd до 8 % величина ЭЗЗ практически линейно уменьшается до 4 мэВ, а при последующем увеличении Δd до 15 % значение ЭЗЗ вновь начинает увеличиваться и достигает 57 мэВ. Так же, как и в предыдущем случае, на рис. 2*е–и* красными символами выделены вклады атомов из первого СБ. Стоит отметить, что при увеличении Δd вклад поверхностных атомов в верхний конус практиче-

ски не меняется, при этом вклад в нижнюю часть конуса смещается в нижележащие СБ. На рис. 2ж представлена зависимость величины ЭЗЗ от изменения поверхностного вДВ-промежутка, обозначенного как Δd , выраженного в процентах. Интересным является тот факт, что зависимость величины ЭЗЗ от вДВ-промежутка для данной структуры имеет более резкий характер, чем в случае оптимизированной структуры, а также более симметричный вид относительно точки минимума 8 %.

Важно отметить, что вариация вДВ-интервала между первыми двумя СБ в обеих рассматриваемых структурах MnBi_2Te_4 не приводит к полному закрытию ЭЗЗ. В точке минимума величины ЭЗЗ для оптимизированной и неоптимизированной структур имеют близкие малые значения, равные 5 и 4 мЭВ соответственно (рис. 2г, з).

3. ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ ТПС

Для дальнейшего более детального анализа причин изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 3 и 4 представлены соответствующие пространственные распределения состояний нижней и верхней частей конуса Дирака в области четырех поверхностных СБ в зависимости от величины поверхностного вДВ-расстояния между первым и вторым СБ. На рис. 3 представлены результаты расчетов для структуры с оптимизированными параметрами, а рис. 4 соответствует результатам, полученным для структуры, взятой из работы [21]. Локализация ТПС на каждом атоме n представлена в виде суммы вкладов орбиталей $\phi_m(n)$ атома n в ТПС в данной $\mathbf{k}$ -точке:

$$w_{\mathbf{k}}(n) = \sum_m |\langle \phi_m(n) | \text{ТПС}_{\mathbf{k}} \rangle|^2,$$

где индекс суммирования « m » пробегает орбитали атома n . При этом $|\text{ТПС}_{\mathbf{k}}\rangle$ идентифицировались как электронные состояния в объемной запрещенной зоне со значительной поверхностной локализацией. Относительная величина локализации ТПС $w(n)$ оценивалась как среднее значение $w_{\mathbf{k}}(n)$ по трем $\mathbf{k}$ -точкам, ближайшим к точке Г. На рис. 3 для каждого распределения ТПС показаны соответствующие величины изменений поверхностного вДВ-промежутка (по отношению к объемному значению).

Стоит отметить, что результаты расчетов, представленные на рис. 3 и рис. 4 для двух вариантов структурных ячеек MnBi_2Te_4 , имеют схожий вид. В отсутствие сильного растяжения вДВ-промежут-

ка ТПС (как верхней, так и нижней частей дираковского конуса) демонстрируют локализацию преимущественно в области первого СБ с некоторой долей в области второго СБ. При увеличении вДВ-промежутка ТПС постепенно перераспределяются в область второго и частично третьего СБ. В соответствии с зависимостями, представленными на рис. 2д, ж, подобное перераспределение ТПС сопровождается уменьшением ЭЗЗ до точки минимума (при растяжениях 3.46 и 8 % для двух рассматриваемых элементарных ячеек), а затем сменяется ростом величины ЭЗЗ. При этом в точке минимума ЭЗЗ степени локализации ТПС в первом и втором СБ практически эквивалентны, а при дальнейшем увеличении вДВ-промежутка ТПС значительно перераспределяются в область третьего СБ.

Проведенный анализ позволяет предположить, что поведение зависимости ЭЗЗ при изменении величины поверхностного вДВ-промежутка может быть напрямую связано с перераспределением ТПС между СБ, имеющими противоположные направления магнитных моментов слоев Mn. Иначе говоря, когда плотность ТПС смещается в область второго СБ, который характеризуется противоположными магнитными моментами на атомах Mn по сравнению с первым СБ, обменное поле, действующее на ТПС, уменьшается, что сопровождается уменьшением величины ЭЗЗ. При дальнейшем смещении плотности ТПС в сторону третьего СБ, имеющего такое же направление магнитного момента, как и первый СБ, величина ЭЗЗ в точке Дирака снова увеличивается.

В качестве некоторого количественного показателя влияния локализации ТПС на величину ЭЗЗ в точке Дирака рассмотрим усредненную плотность ТПС, Δw , рассчитанную на основе локальной плотности состояний $w(n)$, умноженной на $(-1)^s$, где s — номер СБ (что учитывает разницу в направлениях магнитных моментов на атомах Mn в соседних СБ), и просуммированную по четырем поверхностным СБ для состояний нижней и верхней частей конуса Дирака по отдельности. На рис. 3е и рис. 4е представлены зависимости рассчитанного параметра Δw от величины первого вДВ-промежутка для оптимизированной ячейки и ячейки, взятой из работы [21], соответственно. На рис. 3е и рис. 4е видно, что зависимости Δw для состояний нижнего конуса для двух анализируемых элементарных ячеек демонстрируют схожий убывающий характер с увеличением Δd . Для состояний верхней части дираковского конуса в целом наблюдается постепенное достаточно слабое убывание величины Δw .

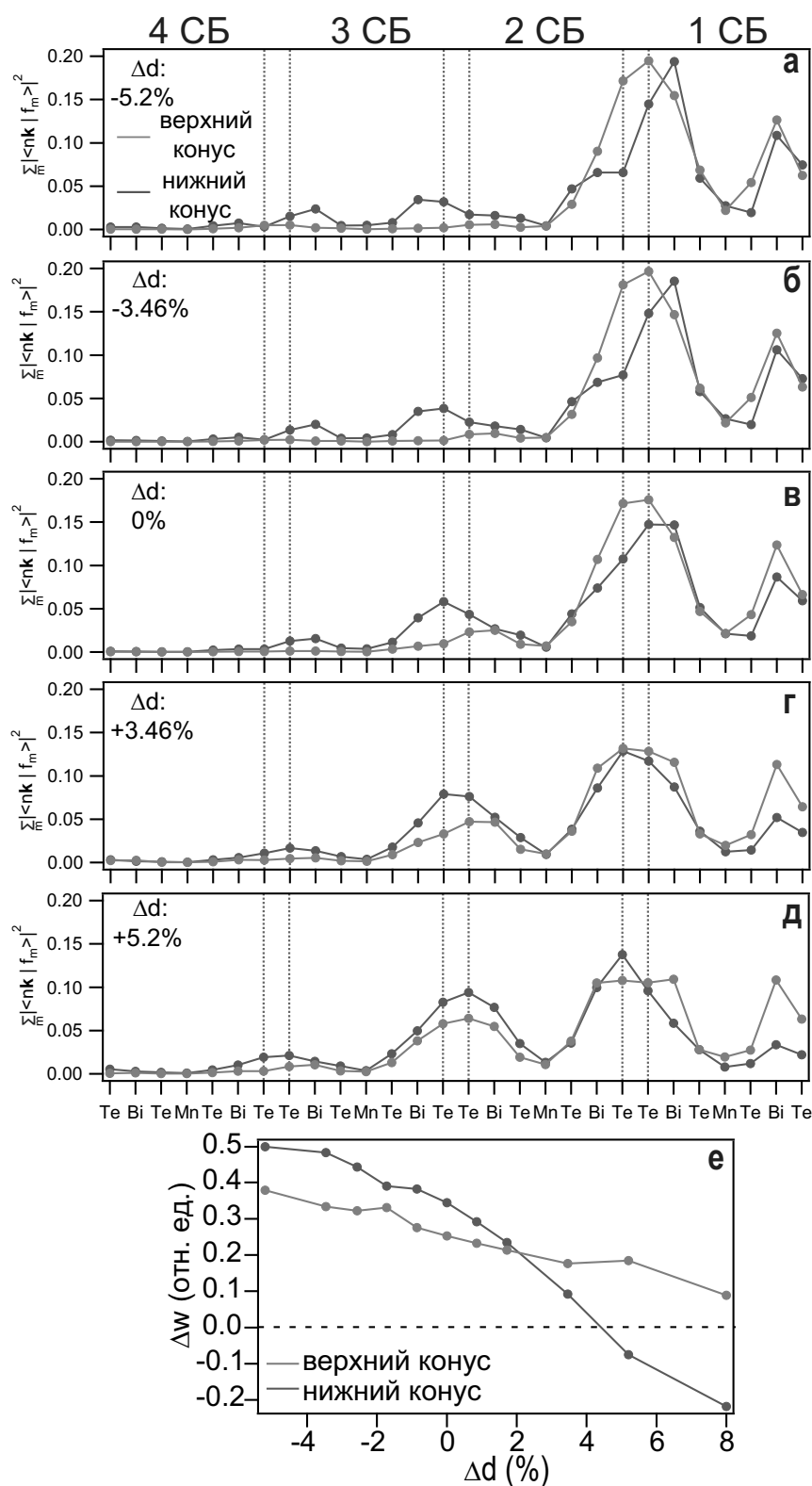


Рис. 3. (В цвете онлайн) *a–д*) Перераспределение плотности ТПС верхней и нижней частей (красный и синий цвета соответственно) конуса Дирака в области верхних четырех СБ в зависимости от модуляции вДВ-расстояния между первым и вторым СБ. Здесь же отмечены величины изменений вДВ-промежутка в процентах по отношению к объемному значению (2.896 Å). *е*) Изменения плотности ТПС, просуммированные по четырем поверхностным СБ для состояний верхней и нижней частей конуса Дирака (красный и синий цвета соответственно). Данные представлены для расчета структуры с оптимизированными параметрами

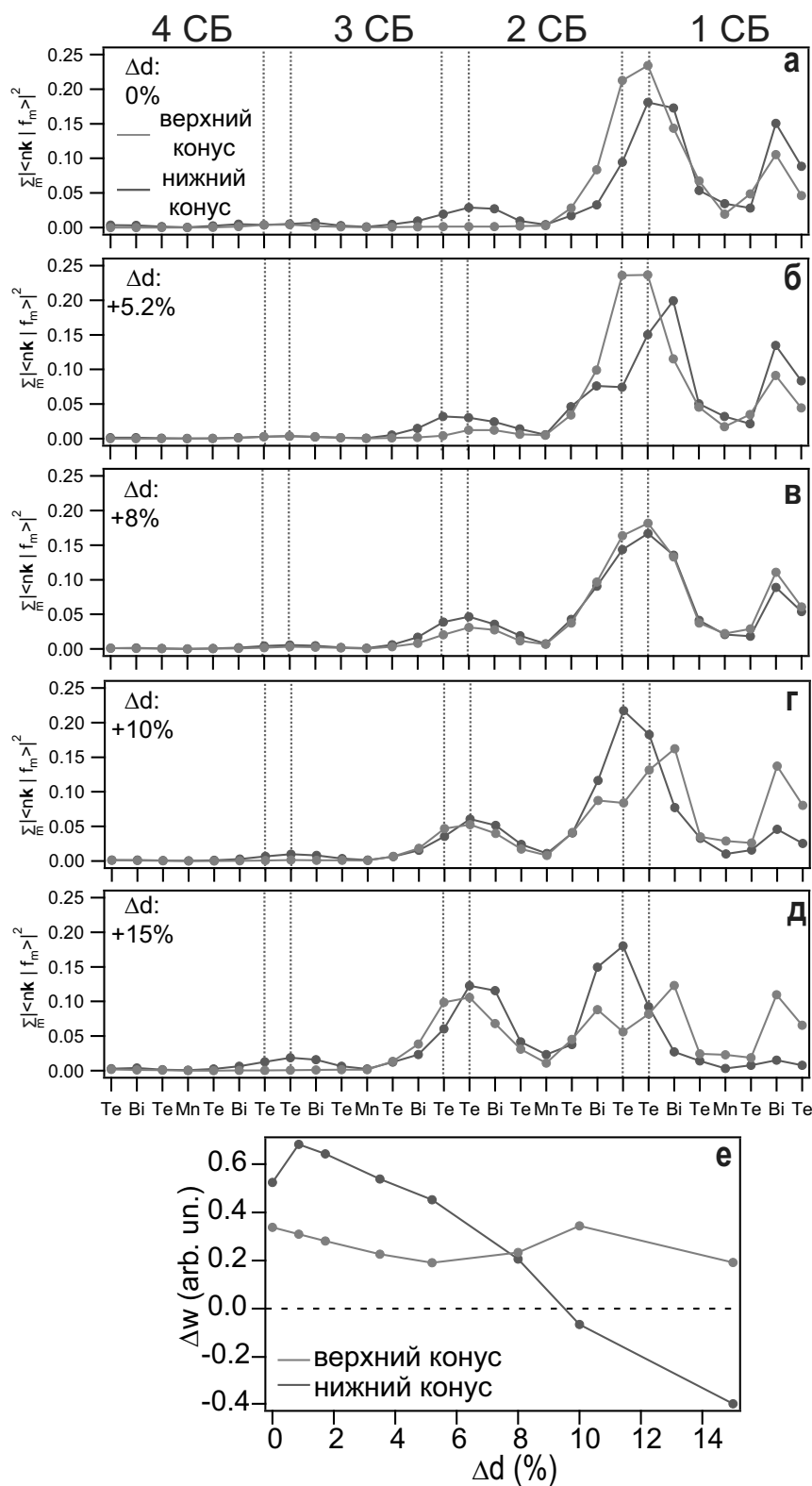


Рис. 4. (В цвете онлайн) *a–d*) Перераспределение плотности ТПС верхней и нижней частей (красный и синий цвета соответственно) конуса Дирака в области верхних четырех СБ в зависимости от модуляции вдВ-расстояния между первым и вторым СБ. Здесь же отмечены величины изменений вдВ-промежутка в процентах по отношению к объемному значению (2.731 Å). *e*) Изменения плотности ТПС, усредненные по четырем поверхностным СБ для состояний верхней и нижней частей конуса Дирака (красный и синий цвета соответственно). Данные представлены для расчета структуры, взятой из работы [21]

Интересно, что представленные зависимости показывают изменение знака Δw для нижней части состояний конуса Дирака, которые более чувствительны к изменениям поверхностного вДВ-интервала. В этом случае точка перехода через нуль для обеих структур приблизительно соответствует минимуму величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 2*д,к*. Это можно объяснить тем, что в данной точке происходит изменение знака эффективного обменного поля, влияющего на ТПС. Небольшое несоответствие положения минимума ЭЗЗ и изменения знака обменного поля могут быть связаны с варьированием орбитального состава ТПС, которое вызвано изменением перекрывания орбиталей атомов Mn, Bi и Te при различных структурных модификациях элементарной ячейки.

4. МЕТОДЫ

Расчеты электронной структуры были проведены с использованием программного кода OpenMX, в котором реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциалов, сохраняющих норму [44], и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [45–47]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его PBE-версии [48]. Сетка интегрирования в прямом пространстве определялась энергией обрезания 450 Ry, а в обратном пространстве, для разбивки поверхностной зоны Бриллюэна, сетка задавалась как $5 \times 5 \times 5$ k -точек в случае расчетов объема кристалла и $5 \times 5 \times 1$ k -точек при наличии поверхности. Критерий сходимости по полной энергии был выбран равным $1 \cdot 10^{-6}$ эВ. Базисные функции задавались следующим образом: Bi 8.0 $s3p2d2f1$, Te 7.0 $s3p2d2f1$, Mn 6.0 $s3p2d1$. Состояния Mn $3d$ рассматривались в рамках подхода DFT+ U [49] в схеме Дударева с параметром $U = 5.4$ эВ [21]. Структурная оптимизация проводилась путем подбора параметров решетки a , b , c и относительных положений атомов внутри элементарной ячейки. При этом параметр c менялся путем изменения вДВ-промежутков между СБ. Элементарная ячейка поверхности MnBi_2Te_4 состояла из шести СБ и вакуумного слоя толщиной 12 Å.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе детально проанализированы возможные изменения в электронной структуре ТПС, а также ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для АФМ ТИ MnBi_2Te_4

при вероятных структурных модификациях элементарной ячейки. Установлено, что вариация поверхностного вДВ-промежутка влияет на величину ЭЗЗ, открываемую в точке Дирака, в широком диапазоне от 80 до 4–5 мэВ.

Изменение величины поверхностного вДВ-промежутка приводит к значительному перераспределению ТПС между соседними СБ с противоположной ориентацией магнитных моментов на атомах Mn, которое в основном и определяет модуляцию величины ЭЗЗ. В этом случае рассчитанный немонотонный характер изменения величины ЭЗЗ связан с аналогичным поведением усредненной локальной плотности состояний ТПС. При этом минимум величины ЭЗЗ в точке Дирака соответствует точке изменения знака обменного поля, действующего на ТПС.

Расчеты для систем с различными структурами показали, что незначительная вариация параметров кристаллической решетки может привести к заметным изменениям в электронной структуре MnBi_2Te_4 . Было показано, что процедура структурной оптимизации элементарной ячейки MnBi_2Te_4 в рамках теории функционала плотности приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными. Кроме того, полученные результаты позволяют нам сделать предположение о том, что наличие в литературных источниках различающихся экспериментальных данных о величине ЭЗЗ для ТПС в MnBi_2Te_4 может быть связано с возникновением различных структурных изменений поверхности кристалла.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 94031444) и Российского научного фонда (грант № 18-12-00062).

ЛИТЕРАТУРА

1. X.-Li. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al., Science **340**, 167 (2013).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nature Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
5. C. Z. Chang, W. Zhao, D. Kim et al., Nature Mater. **14**, 473 (2015).

6. M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo et al., *Nature Nanotechn.* **14**, 408 (2019).
7. K. Burch, D. Mandrus, and J.-G. Park, *Nature* **563**, 47 (2018).
8. X. Lin, W. Yang, K.L. Wang et al., *Nature Electron.* **2**, 274 (2019).
9. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley et al., *Nature Nanotechn.* **11**, 231 (2016).
10. L. Šmejkal, Y. Mokrousov, B. Yan et al., *Nature Phys.* **14**, 242 (2018).
11. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi et al., *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
12. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi et al., *Science* **367**, 895 (2020).
13. A. Essin, J. Moore, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 146805 (2009).
14. S. Coh, D. Vanderbilt, A. Malashevich et al., *Phys. Rev. B* **83**, 085108 (2011).
15. S.-Y. Xu, M. Neupane, C. Liu et al., *Nature Phys.* **8**, 616 (2012).
16. Y. L. Chen, J. H. Chu, J. G. Analytis et al., *Science* **329**, 659 (2010).
17. J. G. Checkelsky, J. Ye, Y. Onose et al., *Nature Phys.* **8**, 729 (2012).
18. A. M. Shikin, A. A. Rybkina, D. A. Estyunin et al., *Phys. Rev. B* **97**, 245407 (2018).
19. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, Yu. I. Surnin et al., *Sci. Rep.* **9**, 4813 (2019).
20. J. Henk, A. Ernst, S. V. Eremeev et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206801 (2012).
21. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature* **576**, 416 (2019).
22. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
23. J. Li, Y. Li, S. Du et al., *Science Advances* **5**, eaaw5685 (2019).
24. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al., *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
25. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al., *Phys. Rev. Res.* **1**, 012011 (2019).
26. Z. S. Aliev, I. R. Amirasanov, D. I. Nasonova et al., *J. Alloys Comp.* **789**, 443 (2019).
27. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 107202 (2019).
28. C. Liu, Y. Wang, H. Li et al., *Nature Mater.* **19**, 522 (2020).
29. J. Ge, Y. Liu, J. Li et al., *Nat. Sci. Rev.* **7**, 1280 (2020).
30. A. Gao, Y.-F. Liu, C. Hu et al., *Nature* **595**, 52 (2021).
31. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Н. Л. Зайцев и др., *ЖЭТФ* **161**, 126 (2022).
32. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., *Appl. Phys. Lett. Mater.* **8**, 021105 (2020).
33. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al., *Sci. Rep.* **10**, 1 (2020).
34. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al., *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
35. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
36. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
37. P. Swatek, Y. Wu, L. L. Wang et al., *Phys. Rev. B* **101**, 161109 (2020).
38. D. Nevola, H. X. Li, J.-Q. Yan et al., *Phys. Rev. Lett.* **125**, 117205 (2020).
39. C. Yan, S. Fernandez-Mulligan, R. Mei et al., *Phys. Rev. B* **104**, L041102 (2021).
40. B. A. Bernevig, C. Felser, and H. Beidenkopf, *Nature* **603**, 41 (2022).
41. M. Garnica, M. M. Otrokov, P. C. Aguilar et al., *Quant. Mater.* **7**, 1 (2022).
42. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова и др., *Письма ЖЭТФ* **115**, 241 (2022).
43. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich et al., *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).
44. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
45. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
46. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
47. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
48. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
49. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СКОРОСТИ НАБЕГАЮЩЕГО ПОТОКА НА ТЕЧЕНИЕ, ИНДУЦИРУЕМОЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ БАРЬЕРНЫМ РАЗРЯДОМ

П. А. Поливанов^{*}, О. И. Вишняков, В. А. Кисловский, А. А. Сидоренко

^a *Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 9 ноября 2022 г.,
после переработки 21 декабря 2022 г.
Принята к публикации 12 января 2023 г.

Плазменные актуаторы на базе диэлектрического барьерного разряда (ДБР) рассматриваются в качестве перспективного способа управления сдвиговыми течениями. Основным их достоинством является возможность разгона потока за счет ионного ветра без использования подвижных элементов. Вопрос генерации ионного ветра ДБР в покоящемся газе достаточно хорошо исследован. Вместе с тем практически все аэродинамические приложения исследуемого метода управления потоком предполагают наличие внешнего течения. Однако процесс возникновения объемной силы в ДБР в таких условиях подробно не изучен. Детальному изучению данного эффекта посвящена настоящая работа. Для исследования влияния ДБР на распределение скорости около электродов использован метод PIV, также рассчитана объемная сила, генерируемая ионным ветром. Полученные данные демонстрируют существенное влияние скорости набегающего потока на процесс генерации ионного ветра.

DOI: 10.31857/S0044451023050103
EDN: BFBIOQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Плазменные актуаторы широко используются в работах, посвященных управлению ламинарно-турбулентным переходом [1–3] и отрывными течениями [4–6]. Основные их преимущества состоят в малой инерционности (способности вносить возмущения высокой частоты), возможности размещения электродов заподлицо с поверхностью, отсутствии подвижных механических элементов и комбинации нескольких факторов воздействия на поток. Одним из основных воздействий электрического разряда в работах [1, 4–6] является стационарный или импульсный нагрев потока. В основном данный фактор является важным для скоростных течений, в которых локальное тепловыделение способно существенно изменять конфигурацию ударных волн.

Другим фактором воздействия является генерация объемной электрогазодинамической силы за счет передачи дополнительного импульса потоку посредством столкновения ионов газа с нейтральны-

ми молекулами — ионного ветра [7]. Наиболее распространенными способами создания ионного ветра являются коронный разряд и диэлектрический барьерный разряд (ДБР). Наличие диэлектрического барьера между электродами делает ДБР более устойчивым к электрическому пробое в сравнении с коронным разрядом, что объясняет его распространенность в исследованиях, посвященных управлению течениями [2, 3, 5].

ДБР представляет собой электрический разряд, который состоит из множества локализованных в пространстве и короткоживущих (обычно менее 100 нс) плазменных образований. В отсутствие дефектов в диэлектрическом материале и электродах при длительной экспозиции (например, при зрительном восприятии человеком) наблюдается равномерное свечение плазмы ДБР. Появление плазменных образований приводит к возникновению активной компоненты тока и периодическому переносу/уносу заряда с поверхности диэлектрика. Нестационарные плазменные образования формируют множественные ударные волны, которые детектируются в дальнем поле в виде акустических волн с широкополосным спектром. При работе ДБР в воздушной среде возникают электроотрица-

^{*} E-mail: polivanov@itam.nsc.ru

тельные ионы кислорода, которые под воздействием электрического поля формируют ионный ветер.

Процесс генерации объемной силы (тяги) ДБР подробно исследуется в течение последних 20 лет. Так, например, экспериментально установлена существенная нестационарность генерируемой объемной силы [8], доказано существенное влияние концентрации кислорода в кислородно-азотной среде на тягу, создаваемую ДБР [9, 10], продемонстрирована зависимость тяги ДБР от влажности окружающей среды [9, 11] и т. д. Достаточно подробно исследования ионного ветра в ДБР описаны в работах [12–14]. При изучении обзоров и недавних публикаций [15] установлено, что все исследования, посвященные процессу возникновения ионного ветра и тяги ДБР, проводились для условий покоящегося газа. Учитывая тот факт, что основной причиной формирования ионного ветра являются электроотрицательные ионы кислорода, которые могут сноситься внешним течением, следует ожидать, что наличие внешнего потока способно существенно изменить силу, генерируемую ДБР. По результатам анализа литературных источников таких исследований не найдено. Традиционно в случае использования ДБР для управления сдвиговыми течениями скорость внешнего потока сопоставима либо существенно превышает величину ионного ветра, генерируемую в условиях покоящегося газа.

Большинство численных моделей, позволяющих рассчитывать объемную электрогазодинамическую силу, генерируемую ДБР, используют эмпирические данные [13, 15]. Причиной этого является стримерная природа ДБР, которую сложно моделировать ввиду различных физических процессов, происходящих в подобных разрядах [16–19]. Кроме того, существенная проблема численного моделирования ДБР состоит в разнице временных масштабов моделируемых явлений. Так, характерные частоты ДБР обычно составляют около 10 кГц, что соответствует периоду $\tau \approx 0.1$ мс, а характерное время жизни одиночного стримера на несколько порядков меньше ($\tau \approx 0.1$ мкс). В работах [20, 21] описано моделирование процессов, протекающих в стримере ДБР, но для моделирования течения, формирующегося за несколько периодов работы ДБР, требуются более сложные численные модели и большие вычислительные мощности. Поэтому важным становится проведение экспериментов, позволяющих прояснить физику образования ионного ветра в ДБР. Целью настоящей работы является определение влияния внешнего потока на объемную силу, генерируемую ДБР.

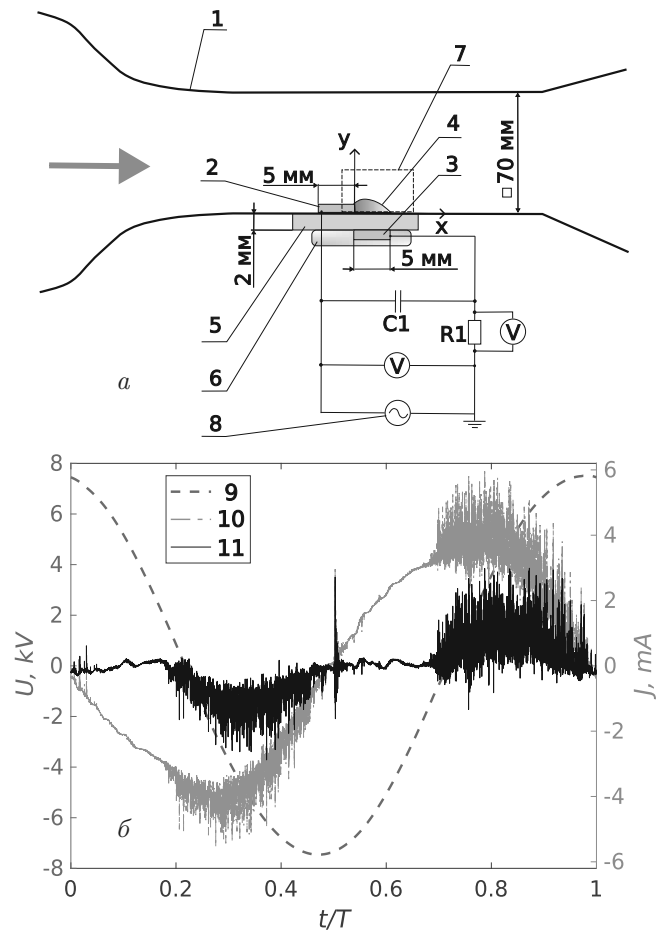


Рис. 1. а) Схема эксперимента. б) Осциллограмма тока и напряжения на ДБР. 1 — дозвуковой канал, 2 — внешний (высоковольтный) электрод, 3 — заземленный (внутренний) электрод, 4 — плазменная область, 5 — диэлектрик, 6 — ПВХ-пленка, 7 — зона PIV-измерений, 8 — высоковольтный источник переменного напряжения, 9 — осциллограмма напряжения на ДБР, 10 — полный ток в цепи питания ДБР, 11 — активная компонента тока

2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперимент проводился при атмосферном давлении и комнатной температуре в канале квадратного сечения со сторонами 70 мм. Схема эксперимента представлена на рис. 1а. Для создания потока использовался вентилятор, установленный на выходе из канала. Воздух в канал втягивается из атмосферы через профилированное сопло. Стенки канала изготовлены из органического стекла, что позволяет проводить оптические наблюдения течения на любом участке. На нижней стенке канала предусмотрено прямоугольное отверстие для установки объекта исследования — в данном случае ДБР.

При изготовлении плазменного актуатора в качестве диэлектрического барьера использовалась

стеклянная пластина толщиной 2 мм, на противоположных поверхностях которой располагалась пара алюминиевых электродов шириной 5 мм и протяженностью поперек потока 30 мм. Перекрытие электродов составляло 1 мм. Внешний электрод располагался в потоке, внутренний электрод был заземлен и изолировался от атмосферы слоем ПВХ-пленки. Вставка с ДБР устанавливалась заподлицо со стенкой канала. Электроды были размещены на расстоянии 165 мм от кромки сопла, что обеспечивало толщину пограничного слоя в районе открытого электрода ДБР порядка 2–4 мм в зависимости от скорости потока.

На электроды подавалось напряжение синусоидальной формы частотой 7.3 кГц и амплитудой 7.5 кВ. Параллельно к ДБР для снижения резонансной частоты колебательного контура, образованного межэлектродной емкостью и индуктивностью катушки трансформатора источника высокого напряжения, подключался конденсатор C_1 . Ток и напряжение на электродах измерялись цифровым осциллографом RIGOL DS1102E. Для измерения напряжения использовался высоковольтный пробник Tektronix P6015A. Полный ток измерялся по падению напряжения на резисторе $R_1 = 107 \text{ Ом}$ (см. рис. 1а). Пример осциллограмм напряжения, полного тока в цепи питания разряда и активной компоненты тока приведен на рис. 1б. Для расчета активной компоненты тока применялась следующая методика. Предполагается, что ДБР можно представить в виде эквивалентной схемы, состоящей из двух элементов, соединенных последовательно: емкости C , создаваемой межэлектродным промежутком ДБР, и сопротивления R , возникающего из-за проводов, разъемов и других элементов цепи. Падение напряжения на конденсаторе C принимается приблизительно равным измеряемому напряжению. В результате получена следующая зависимость тока в цепи от напряжения:

$$I_r(t) = C \frac{\partial U(t)}{\partial t} + C^2 R \frac{\partial^2 U(t)}{\partial t^2}. \quad (1)$$

Коэффициенты C и $C^2 R$ находятся методом наименьших квадратов из осциллограмм тока и напряжения во временных промежутках, когда плазма отсутствует. Считая, что емкость C существенно не изменяется при появлении плазмы, активная компонента тока определяется как $I_a(t) = I(t) - I_r(t)$. При таком подходе мощность, потребляемая ДБР, $P = \int U(t)I(t)dt$, и мощность, рассчитанная на основе активной компоненты тока как $P_a = \int U(t)I_a(t)dt$, различались не более чем

на 5%, что позволяет считать выбранный метод расчета активной компоненты тока корректным.

Активная компонента тока возникает вследствие перетекания положительного или отрицательного заряда на поверхность диэлектрика в зависимости от фазы разряда. Наличие активной компоненты тока позволяет определять на осциллограмме моменты времени горения разряда. Изменение внешней скорости потока не приводило к значимому изменению осциллограмм тока и напряжения.

Измерения скорости осуществлялись PIV-комплексом (Particle image velocimetry) на основе лазера Litron 135-15 и камеры Hamamatsu C8484-05C. Поток засеивался микрочастицами со средним размером 1 мкм. Восстановление поля скорости по изображениям трассеров проводилось с использованием кросс-корреляционных адаптивных алгоритмов с непрерывным смещением окна и однократным делением сетки. Случайная ошибка измерений мгновенных векторов скорости в данных экспериментах не превышала 1%. Измерения проводились в среднем сечении канала. Начало системы координат в экспериментах привязано к правому краю открытого электрода. Ось X направлена вниз по потоку, ось Y — по нормали к стенке. Лазерный луч вводился со стороны сопла. Чтобы получить данные об эволюции ионного ветра в течение периода колебаний напряжения разряда, система PIV была синхронизирована с ДБР так, что измерения проводились с программируемой задержкой относительно начала цикла разряда. Задержка моментов измерений вычислялась как $\tau = \tau_0 + nT + T/16$, где T — период работы ДБР, n — целое число, τ_0 — задержка между импульсом напряжения ДБР и триггером срабатывания первого лазера PIV-системы.

Для обеспечения достоверности данных, получаемых PIV-методом в области ионизированного газа, была выполнена предварительная проверка метода. Во-первых, PIV-измерения были выполнены с использованием разных средств засеивания потока (капель DEHS и сажевых частичек, образующихся при сгорании сандаловых палочек). Значимой разницы в данных не обнаружено, засев потока не приводит к изменению электрических характеристик ДБР. Во-вторых, была выполнена верификация PIV-метода данными, полученными с использованием насадки полного давления. Установлено, что в области плазмы разница в определении максимальной скорости составляет около 7%. В области следа эта разница уменьшается до 2%. Величина среднеквадратичного отклонения между измеренными профилями скорости составила 13% в плаз-

менной области и 5% в области следа. Полученные результаты демонстрируют, что использование метода PIV для измерений скоростей в низкотемпературной плазме, генерируемой ДБР, можно считать обоснованным, по крайней мере, при исследуемых параметрах ДБР.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 2 представлены поля объемной силы, генерируемой ДБР в момент $t/T = 0.6$, что соответствует моменту максимального ускорения потока. Данные, представленные на рис. 2а, относятся к случаю покоящегося газа, а данные на рис. 2б — к случаю с внешним потоком ($V_\infty = 11$ м/с). Объемная сила, генерируемая ДБР, определена в результате решения системы уравнений (2), полученной из уравнений Навье–Стокса. Небольшие скорости по-

тока и слабый нагрев газа в ДБР позволяют сделать предположение о постоянстве плотности и вязкости газа. Членами системы уравнений, которые отвечают за учет градиента давления, приходится пренебрегать из-за невозможности измерения распределения нестационарного давления в области плазмы. Тем не менее в обзоре [13] указывается на хорошее совпадение значений тяги ДБР, измеренной весовым и PIV-методами, что свидетельствует о малости влияния градиента давления по сравнению с объемной силой, создаваемой разрядом. Анализ членов в системе уравнений Навье–Стокса позволяет сделать вывод о том, что основной вклад в нестационарную объемную силу вносит производная скорости по времени, а вклад конвективных и вязкостных членов существенно меньше. Для расчета объемной силы в данной работе использованы сглаженные по времени и пространству поля скорости, поскольку наличие неоднородностей существенно влияет на расчет производных по экспериментальным данным:

$$\begin{aligned} F_x &= \rho \left(\frac{\partial U_x}{\partial t} + U_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + U_y \frac{\partial U_x}{\partial y} \right) - \mu \left(\frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} \right), \\ F_y &= \rho \left(\frac{\partial U_y}{\partial t} + U_x \frac{\partial U_y}{\partial x} + U_y \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) - \mu \left(\frac{\partial^2 U_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial y^2} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Поле объемной силы, генерируемой ДБР в отсутствие внешнего потока, представлено на рис. 2а. Как показано в работе [8], направление силовых линий обусловлено распределением заряда в пространстве, электрическим полем, образующимся из-за разности потенциалов между внешним электродом и поверхностью диэлектрика, а также потенциалом закрытого нижнего электрода. Однако в связи с тем, что напряженность электрического поля убывает пропорционально квадрату расстояния, а расстояние между электродами много больше, чем расстояние между внешним электродом и диэлектриком, влияние потенциала нижнего электрода несущественно. В рассматриваемый момент времени отрицательная фаза ДБР завершена (см. рис. 1б), в результате чего произошло образование отрицательных ионов в плазменной области. При этом внешний электрод обладает отрицательным потенциалом по отношению к поверхности диэлектрика, на которой остался положительный заряд. В соответствии с этим, направление силовых линий определяется электрическим полем, создаваемым внешним электродом и поверхностью диэлектрика. В результате наибольшая по величине сила сосредоточена в слое от поверхности до высоты $Y = 1$ мм и примерно до середины протяженности плазменной области — $X \approx 2$ мм. По мере удаления от внешнего электрода

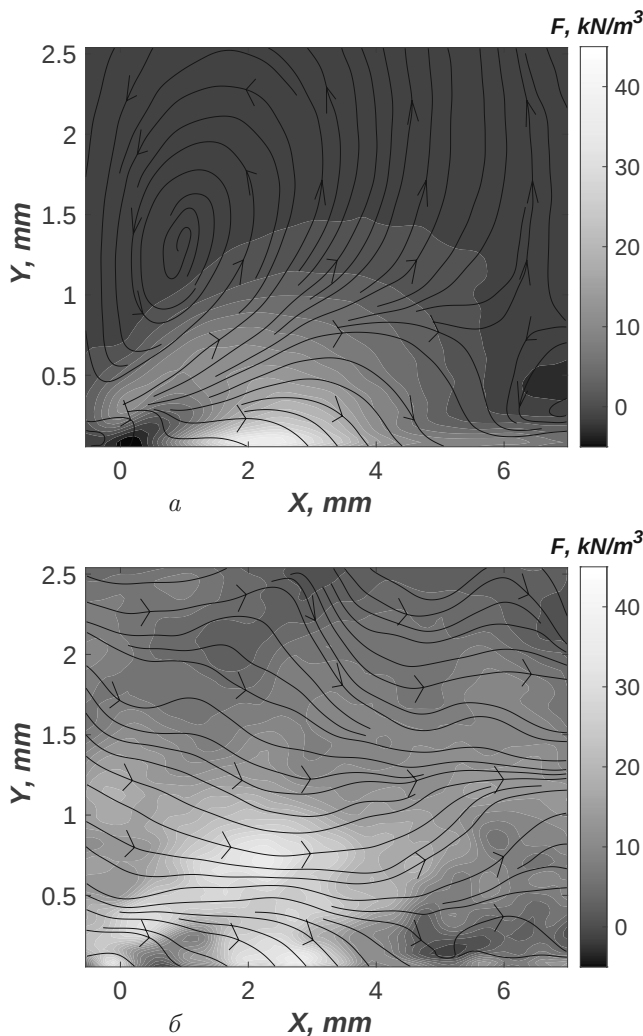


Рис. 2. Поле объемной силы, генерируемой ДБР, при $V = 0$ (а), 11 м/с (б)

вдоль X величина силы уменьшается, а силовые линии устремляются в поверхность. Видно, что выше плазменной области значение силы близко к нулю, а силовые линии идут как в направлении от поверхности в области над нижним электродом, так и по направлению к поверхности в области над верхним открытым электродом. Можно допустить, что в данной области ионов должно быть существенно меньше либо они могут вообще отсутствовать. Поэтому такое поведение силовых линий, вероятно, объясняется не столько действием объемной силы ДБР, сколько возникновением градиента давления из-за подсасывающего действия ионного ветра.

Поле объемной силы при наличии внешнего течения представлено на рис. 2б. Направление силовых линий вблизи стенки схоже со случаем покоящегося газа, однако максимум силы наблюдается несколько дальше от кромки верхнего электрода вдоль оси X . Существенно отличается и распределение значения объемной силы при удалении от стенки. При наличии внешнего потока наблюдается расширение зоны ускорения, при этом даже вдали от стенки ($Y = 1$ мм) значение разгоняющей силы сопоставимо по величине с силой, действующей около поверхности. Кроме того, по всей измерительной области направление действия объемной силы направлено вниз по потоку. Такое изменение картины действия силы вне плазменной области, скорее всего, обусловлено двумя факторами: уносом ионов из области горения разряда из-за наличия внешнего течения и ослаблением градиента давления из-за уменьшения подсасывающей силы ДБР при появлении внешнего течения.

Эволюция продольной компоненты объемной силы по времени, вычисленной по (2) и усредненной по пространству при разных скоростях набегающего потока, приведена на рис. 3а. Сначала рассмотрим данные, полученные для случая покоящегося газа. Из рисунка видно, что максимальный разгон потока наблюдается в момент окончания отрицательной фазы ДБР. В начале положительной фазы горения разряда наблюдается максимальное значение тормозящей объемной силы, которая по модулю меньше максимальной силы, реализующейся при разгоне течения. Далее следует временной промежуток с околонулевым значением объемной силы, возникающий из-за отсутствия отрицательно заряженных ионов кислорода. Такой результат соответствует данным, полученным в работе [8]. В экспериментах с набегающим потоком также присутствует фаза разгона в момент окончания отрицательной фазы ДБР. С ростом скорости набегающего потока положитель-

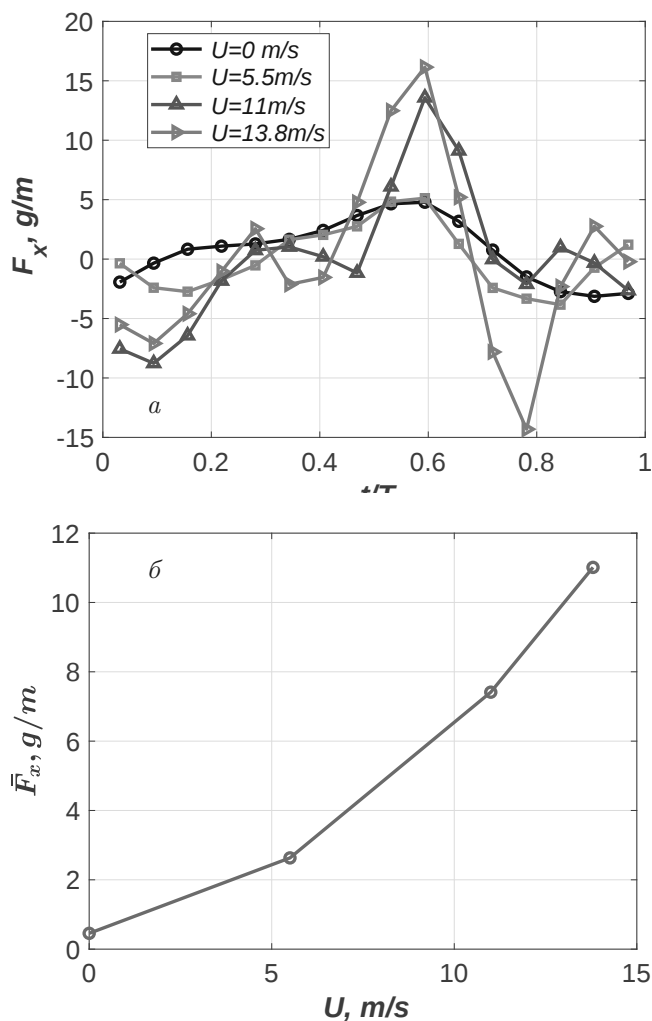


Рис. 3. а) Изменение объемной силы, генерируемой ДБР, в течение одного цикла колебаний напряжения разряда. б) Зависимость усредненной по времени силы, генерируемой ДБР, в зависимости от скорости набегающего потока

ная сила растет по амплитуде. Далее, как и в случае без внешнего потока, начинается фаза торможения. Однако при наличии внешнего потока смена направления действия объемной силы происходит резче. Фаза торможения также заканчивается быстрее, в отличие от случая без внешнего течения. Эффект наблюдается для всех скоростей набегающего потока, и с ростом скорости амплитуда силы торможения потока ионным ветром усиливается. Далее, в отличие от случая без потока, сила становится околонулевой, после чего следует еще одна (новая) фаза торможения. В конце периода колебаний напряжения, во время отрицательной фазы горения разряда тормозящая сила уменьшается до околонулевых значений, после чего начинается новый период, и снова начинается фаза ускорения.

Данные изменения в эволюции силы по времени демонстрируют существенную перестройку действия ионного ветра на поток при появлении внешнего течения. Можно предположить, что причиной этого является более интенсивный унос заряда из зоны электрического поля ДБР при появлении внешнего потока. Кроме того, поток может оказывать влияние на процесс накопления заряда поверхностью диэлектрика. Данный факт требует более детального изучения и должен приниматься во внимание при численном моделировании ионного ветра, генерируемого ДБР, в задачах управления сдвиговыми течениями.

В связи с асимметрией генерации положительной и отрицательной объемной силы ДБР в течение цикла разряда, при усреднении по времени возникает ненулевой ионный ветер, собственно и являющийся источником усредненной силы тяги. Для оценки влияния набегающего потока на формирование ионного ветра воспользуемся формулой, по которой воздействие ионного ветра рассчитывается как разница интегралов вдоль оси Y от динамического напора при работающем разряде и без него:

$$\overline{F_x} = 0.5\rho \left(\int (U_x^2)_{DBD} dy - \int U_x^2 dy \right). \quad (3)$$

Интегрирование проводилось в сечении $X = 6$ мм, непосредственно ниже по потоку от плазменной области. Причина использования формулы (3), а не формулы (2), для расчета усредненной по времени объемной силы заключается в относительном уменьшении дефекта скорости потока, создаваемого ДБР, с ростом скорости внешнего течения. Это приводит к росту ошибки определения конвективных членов в уравнении (2) и уменьшению точности определения усредненной объемной силы ДБР при росте скорости набегающего потока.

Результаты расчета усредненного воздействия ионного ветра при различных скоростях набегающего потока представлены на рис. 3б. Видно, что в исследуемом диапазоне скоростей внешнего потока с ростом скорости растет и величина средней объемной силы, генерируемой ДБР. При этом напряжение, подаваемое на ДБР, и потребляемая электрическая мощность изменялись незначительно, в пределах $\pm 1.2\%$ и $\pm 2.5\%$ соответственно. Методика исследований не позволяет выявить причину полученных результатов. Можно только отметить, что с ростом внешней скорости происходит усиление асимметрии между положительной и отрицательной фазами генерации объемной силы.

4. ВЫВОДЫ

Результаты работы показывают существенное влияние внешнего потока на процесс генерации нестационарного ионного ветра в ДБР. Обнаружено, что прирост среднего динамического напора около стенки, возникающий при включении ДБР, возрастает с ростом скорости набегающего потока. Для объяснения физических механизмов, приводящих к возникновению данного эффекта, необходимы более подробные экспериментальные и численные исследования процесса генерации ионного ветра ДБР.

Благодарности. Авторы благодарны Центру коллективного пользования «Механика» за предоставленное оборудование.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-49-08006).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Yatskikh, A. V. Panina, V. L. Kocharin, Yu. G. Yermolaev, A. D. Kosinov, and N. V. Semenov, *Siberian J. Phys.* (in Russ.) **16**, 81 (2021), DOI: 10.25205/2541-9447-2021-16-1-81-90.
2. I. Moralev, V. Bityurin, A. Firsov, V. Sherbakova, I. Selivonin, and U. S. Maxim, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: J. Aerospace Engin.* **42**, 234 (2018).
3. I. A. Moralev and I. V. Selivonin, *Tech. Phys. Lett.* **43**, 220 (2017), <https://doi.org/10.1134/S1063785017020237>.
4. P. A. Polivanov and A. A. Sidorenko, *Tech. Phys. Lett.* **44**, 833 (2018), DOI: 10.1134/S1063785018090262.
5. P. A. Polivanov, A. A. Sidorenko, and A. A. Maslov, *J. Aerospace Engin.* **58**, 234 (2020), DOI: 10.1177/0954410018795542.
6. A. A. Sidorenko, A. D. Budovsky, P. A. Polivanov et al., *Thermophys. Aeromech.* **26**, 465 (2019), <https://doi.org/10.1134/S0869864319040012>.
7. E. D. Fylladitakis, M. P. Theodoridis, and A. X. Moronis, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **42**, 358 (2014).
8. P. A. Polivanov, O. I. Vishnyakov, A. A. Sidorenko et al., *Tech. Phys.* **57**, 457 (2012), <https://doi.org/10.1134/S1063784212040238>.
9. P. A. Polivanov, O. I. Vishnyakov, A. A. Sidorenko, and A. A. Maslov, *EUCASS 2013, Proceedings and Abstracts* (2013).

10. P. Boeuf et al., *5th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2007), <https://doi.org/10.2514/6.2007-183>.
11. N. Benard, N. Balcon, and E. Moreau, *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition* (2009), <https://doi.org/10.2514/6.2009-488>.
12. J.-J. Wang, K.-S. Choi, L.-H. Feng, T. N. Jukes, and R. D. Whalley, *Progr. Aerospace Sci.* **62**, 52 (2013).
13. J. Kriegseis, B. Simon, and S. Grundmann, *Appl. Mech. Rev.* **68**, 020802 (2016).
14. D. E. Ashpis and M. C. Laun, *AIAA J.* **55**, 4181 (2017), doi: 10.2514/1.J055856.
15. S. Sato, H. Furukawa, A. Komuro et al., *Sci. Rep.* **9**, 5813 (2019), <https://doi.org/10.1038/s41598-019-42284-w>.
16. V. R. Soloviev, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45**, 025205 (2012).
17. A. A. Knizhnik, S. V. Korobtsev, D. D. Medvedev et al., *JETP Lett.* **111**, 273 (2020), <https://doi.org/10.1134/S00213640200500823>.
18. D. V. Beloplotov, V. F. Tarasenko, D. A. Sorokin et al., *JETP Lett.* **106**, 653 (2017), <https://doi.org/10.1134/S0021364017220064>.
19. V. F. Tarasenko, V. S. Kuznetsov, V. A. Panarin et al., *JETP Lett.* **110**, 85 (2019).
20. V. R. Soloviev and V. M. Krivtsov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 125208 (2009).
21. V. R. Soloviev and V. M. Krivtsov, *Plasma Sources Sci. Technol.* **27**, 114001 (2018).

СТАТИСТИКА ПАССИВНОГО СКАЛЯРА В ДВУМЕРНОМ СДВИГОВОМ ТЕЧЕНИИ С ФЛУКТУАЦИЯМИ

*Н. А. Ивченко, С. С. Вергелес**

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

*Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики"
111250, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2022 г.,
после переработки 16 декабря 2022 г.
Принята к публикации 19 декабря 2022 г.

Изучаются статистические свойства переноса пассивного скаляра в двумерном потоке, состоящем из постоянного сдвигового течения и относительно слабой гладкой случайной компоненты, с учетом действия слабой, но конечной диффузии. Такая система тесно связана с динамикой переноса скаляра внутри когерентных вихрей, появляющихся в результате обратного каскада в двумерной турбулентности. Рассматривается как свободный распад пассивного скаляра, так и случай непрерывной накачки системы скаляром. В обоих случаях распределение скаляра обладает сильной перемежаемостью, что характеризуют вычисленные в работе одноточечные моменты.

DOI: 10.31857/S0044451023050115
EDN: BFGGCW

1. ВВЕДЕНИЕ

Течение в турбулентном режиме в гидродинамике характеризуется флуктуациями скорости, являющимися случайными как во времени, так и в пространстве. В отношении скалярных полей, переносимых таким потоком (например, температура или концентрация примесей), флуктуации приводят к их перемешиванию, тем самым сглаживая неоднородности в пространстве. Если можно пренебречь обратной реакцией скаляра на жидкость, то его называют пассивным. Процесс перемешивания отличается нетривиальными статистическими свойствами [1].

В настоящей работе рассматривается перемешивание пассивного скалярного поля ϑ в потоке с гладким хаотическим полем скорости с сильной постоянной сдвиговой компонентой. Данная задача мотивирована прежде всего изучением двумерной турбулентности, в которой в результате обратного каскада энергии образуются когерентные вих-

ри [2, 3]. В системе отсчета, связанной с центром вихря, течение можно охарактеризовать как дифференциальное аксиально-симметричное вращение с некоторой крупномасштабной средней скоростью. Профиль направленной по азимуту средней скорости $U(r)$ исследовался как аналитически, так и численно в работах [3–7]. Таким образом, эволюция некоторого сгустка (кляксы) пассивного скаляра с характерным размером, много меньшим, чем расстояние r , может быть рассмотрена как перемешивание в сдвиговом течении, создаваемом когерентным потоком. Это перемешивание происходит под влиянием крупномасштабных флуктуаций потока, возбуждаемых на фоне когерентного течения. Рассматриваемая нами модель, однако, применима также для любого течения, в котором доминирует сдвиговая компонента с наложенными гладкими флуктуациями скорости. Примерами являются течение эластической турбулентности [8–10] и двумерное течение в каналах [11].

Возможны различные постановки задачи: распад некоторого распределения или постоянное возбуждение внешним источником флуктуаций скаляра. В распадной задаче изучается статистика эволюции скаляра со временем. Начальное распределение случайно в пространстве, что может быть экспери-

* E-mail: ssver@itp.ac.ru

ментально реализовано через действие локализованного в пространстве источника в каналах [12], микроканалах [13] и мыльных пленках [14, 15]. Статистически однородное во времени возбуждение флуктуаций скаляра приводит систему в квазистационарный режим. В пределе большого числа Шмидта формируется турбулентный спектр Бэтчелора в интервале масштабов от диффузионного до колмогоровского [16–18]. Этот спектр соответствует каскаду к меньшим масштабам среднеквадратичного отклонения пассивного скаляра, см. численные эксперименты [19, 20]. Для изотропной турбулентности моменты распределения скаляра были изучены аналитически в [21–23] для распадной задачи и в [24] для задачи с непрерывной накачкой. Случай перемешивания в постоянном сдвиговом потоке, где перенос потоком становится детерминированным, рассмотрен в [25]. Перемешивание в потоке со случайной компонентой, наложенной на постоянное сдвиговое течение, изучалось в численном эксперименте [26] в рамках модели Крайчнана.

На масштабах больше диффузионного можно пренебречь ролью диффузии в эволюции пассивного скаляра, тем самым сведя ее к переносу течением. В случае постоянного сдвига вектор между двумя близкими лагранжевыми частицами ориентируется по направлению потока [25], а его длина растет линейно со временем. Направление вдоль течения оказывается неустойчивым стационарным состоянием вектора. Прохождение через него осуществляется за счет действия случайной компоненты течения [27]. В результате вектор разворачивается на угол π и вновь выравнивается параллельно потоку. Такой процесс, называемый проворотом, происходит с некоторой средней частотой. Визуализировать провороты в эксперименте можно через наблюдение за полимерами, см. [28, 29]. Прохождение неустойчивой точки соответствует задаче о диффузии в кубическом потенциале вблизи его положения равновесия. Эта модель носит универсальный характер, описывая ряд нестационарных физических явлений [30]. Процесс проворота сопровождается экспоненциальным ростом расстояния между лагранжевыми траекториями. Это означает, что существование слабой случайной компоненты значительным образом ускоряет процесс перемешивания.

Сначала мы исследуем общие свойства перемешивания, включая статистику лагранжевых траекторий и влияние диффузии. Затем мы изучаем распадную задачу и находим одноточечное среднее $\langle |\vartheta(t)|^\alpha \rangle$. После этого рассматриваем задачу

о непрерывном возбуждении флуктуаций скаляра. Наш анализ аналогичен представленному в работе, посвященной статистически изотропному течению [24], с необходимыми поправками на анизотропию.

2. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Уравнением, описывающим динамику пассивного скаляра ϑ , переносимого случайным потоком $\mathbf{v}$, подверженного диффузии с коэффициентом κ и возбуждаемого внешним источником (накачкой) f , является

$$\partial_t \vartheta + (\mathbf{v} \nabla) \vartheta = \kappa \Delta \vartheta + f. \quad (1)$$

В этом уравнении все величины являются функциями времени t и координаты $\mathbf{r}$. Мы предполагаем, что как в скорости течения $\mathbf{v}$, так и в накачке f имеются случайные составляющие, приводящие к сложному поведению статистики ϑ . Коэффициент диффузии κ предполагается относительно малым.

Мы рассматриваем предел, в котором поле скорости $\mathbf{v}$ достаточно считать гладким, так что оно может быть разложено в ряд Тейлора с радиусом сходимости, превышающим все масштабы задачи, характеризующие распределение пассивного скаляра. Чтобы проследить за процессом перемешивания, перейдем в систему отсчета, движущуюся вместе с некоторой лагранжевой частицей. В ней скорость может быть приближена линейной зависимостью $v_i = (\Sigma_{ik} + \sigma_{ik}) r_k$, где Σ_{ik} и $\sigma_{ik}(t)$ — постоянная и флуктуирующая во времени части градиента скорости. Поскольку в среднем течение предполагается сдвиговым, у матрицы $\hat{\Sigma}$ есть единственный ненулевой элемент $\Sigma_{xy} = \Sigma$, который для определенности мы считаем положительным, $\Sigma > 0$. Тогда уравнение (1) принимает вид

$$\partial_t \vartheta + \Sigma y \partial_x \vartheta + \sigma_{ik} r_k \partial_i \vartheta = \kappa \Delta \vartheta + f. \quad (2)$$

Среднее по времени $\langle \hat{\sigma} \rangle_\sigma = 0$, а условие несжимаемости приводит к $\text{tr} \hat{\sigma} = 0$. Амплитуда флуктуаций относительно мала,

$$\Sigma^{-1} \int \langle \hat{\sigma}(0) \hat{\sigma}(t) \rangle_\sigma dt \ll 1.$$

Для распадной задачи мы предполагаем, что источником создано начальное распределение ϑ_0 в момент времени $t = 0$, которое статистически изотропно в пространстве и имеет гауссову статистику с нулевым средним. Таким образом, статистика полностью определяется корреляционной функцией

$$\langle \vartheta_0(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) \vartheta_0(\mathbf{r}') \rangle_f = \Theta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где индекс « f » означает усреднение по начальному распределению. Функция $\Theta(0) = 1$, $\Theta(\mathbf{r})$ является изотропной и убывает на масштабе $r \sim L$. В случае непрерывной накачки f разумно предположить, что ее одноточечная статистика также является гауссовой, поскольку распределение скаляра является результатом действия случайной накачки в течение долгого времени. Тогда статистические свойства источника полностью определяются парной корреляционной функцией

$$\langle f(t, \mathbf{r}) f(0, 0) \rangle_f = \delta(t) \Theta(r),$$

где $\Theta(r)$ обладает теми же свойствами, что и (3).

Любая корреляционная функция пассивного скаляра является результатом усреднения как по статистике источника, так и по статистике случайного течения. Зафиксируем реализацию случайного течения. Тогда статистика пассивного скаляра остается гауссовой с течением времени, т. е. определяется средним квадратом $\langle \vartheta^2 \rangle_f$. Мы исследуем одноточечные моменты скаляра $\langle |\vartheta|^\alpha \rangle$, которые являются результатом усреднения также и по статистике случайного течения,

$$\langle |\vartheta|^\alpha \rangle = C_\alpha \left\langle \langle \vartheta^2 \rangle_f^{\alpha/2} \right\rangle_\sigma, \quad (4)$$

где

$$C_\alpha = 2^{\alpha/2} \Gamma((\alpha + 1)/2) / \sqrt{\pi}.$$

Должно выполняться условие $\alpha > -1$, чтобы момент имел конечное значение.

Средний квадрат $\langle \theta^2 \rangle_f$ не является решением замкнутого уравнения. Его значение нужно найти, рассмотрев на малых масштабах поведение «частично усредненной» парной корреляционной функции

$$\mathcal{F}(t, \mathbf{r}) = \langle \vartheta(t, 0) \vartheta(t, \mathbf{r}) \rangle_f,$$

которая является результатом усреднения только по статистике начальных условий или накачки и, как следует из (2), удовлетворяет уравнению

$$\partial_t \mathcal{F} + \Sigma y \partial_x \mathcal{F} + \sigma_{ik} r_k \partial_i \mathcal{F} = 2\kappa \Delta \mathcal{F} + \Theta(r). \quad (5)$$

Это уравнение совпадает с уравнением для пассивного скаляра (2), но с удвоенным коэффициентом диффузии. Источник $\Theta(r)$ в правой части уравнения (5) происходит из парной корреляционной функции накачки (3). Для распадной задачи накачка отсутствует, а Θ (3) является начальным условием для $\mathcal{F}$. Нас интересует значение

$$\langle \theta^2 \rangle_f = \mathcal{F}|_{\mathbf{r}=0}.$$

Дальнейшее решение будет построено по следующей схеме. Сначала мы решаем уравнение (5) для произвольного случайного процесса $\hat{\sigma}(t)$ и находим частично усредненное $\langle \vartheta^2 \rangle_f$. Затем проводим усреднение по статистике турбулентных пульсаций для нахождения искомого момента (4). Усреднение происходит путем поиска так называемой оптимальной флуктуации [22, 23] — реализации процесса $\hat{\sigma}$, которая с учетом ее вероятности обеспечивает наибольший вклад в корреляционную функцию. Этот метод применим, поскольку реализации, существенно отличающиеся от оптимальной, вносят значительно меньший вклад в среднее.

3. ЛАГРАНЖЕВЫ ТРАЕКТОРИИ

Диффузия в (1) полагается слабой, что соответствует большому числу Пекле, $Pe = \Sigma L^2 / \kappa \gg 1$. Если отбросить слагаемое с диффузией в (5), эволюция скаляра сводится к переносу вдоль лагранжевых траекторий. Рассмотрим вектор $\ell(t) = \{\ell \cos \psi, \ell \sin \psi\}$, разделяющий две близкие лагранжевы траектории. Его динамика описывается уравнением

$$\frac{d\ell}{dt} = (\hat{\Sigma} + \hat{\sigma})\ell.$$

Динамика угла ψ определяется замкнутым уравнением, которое в пределе относительной слабости флуктуаций течения имеет вид

$$\frac{d\psi}{dt} = -\Sigma \sin^2 \psi + \varsigma, \quad (6)$$

где $\varsigma \equiv \sigma_{yx}$. Случайная компонента ς в (6) становится важной, когда $|\sin \psi| \lesssim \psi_*$, где характерный угол $\psi_* = \varepsilon^{1/3}$ выражается через малый параметр теории $\varepsilon = D/\Sigma \ll 1$. Поэтому мы оставили в (6) только наиболее существенный вклад ς из $\hat{\sigma}$ в этом диапазоне.

Если вне области $|\sin \psi| \lesssim \psi_*$ пренебречь случайной компонентой, динамика угла становится детерминированной и он устремляется обратно в эту область [31],

$$\text{ctg } \psi - \text{ctg } \psi_0 = \Sigma(t - t_0), \quad |\sin \psi| \gg \psi_*, \quad (7)$$

где индекс «0» соответствует некоторому начальному условию. Но из (6) следует, что направленность ℓ вдоль потока не является устойчивой. После того как случайный шум ς диффузионным образом сдвинет угол в область отрицательных значений $\sin \psi$, сдвиговое слагаемое с Σ уведет угол в область $\sin \psi \sim -1$. Событие, когда вектор сделает

половину полного оборота в таком процессе, так что угол ψ уменьшится на π , мы называем проворотом. Повороты происходят со средней частотой

$$\omega = \Sigma \langle \sin^2 \psi \rangle / \pi \sim \psi_* \Sigma.$$

Динамика угла может анализироваться в терминах функции плотности распределения вероятности (PDF) $\mathcal{P}_\psi(t, \psi)$. Поскольку задача является π -периодической, рассмотрим ее на отрезке $[-\pi/2, \pi/2]$ с условием нормировки

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\psi \mathcal{P}_\psi = 1.$$

На больших временах $\omega t \gg 1$ плотность вероятности выходит на стационарное распределение: $\mathcal{P}_\psi(t, \psi) \rightarrow \mathcal{P}_{st}(\psi)$. Оно имеет максимум при $\psi \sim \psi_*$, ширина пика распределения та же, $\sim \psi_*$. Хвосты функции $\mathcal{P}_{st} = \omega_c \psi_* / \sin^2 \psi$ при $|\sin \psi| \gg \psi_*$, что соответствует (7), а средняя частота проворотов равна $\omega = \omega_c \psi_* \Sigma$, где ω_c — некоторый численный коэффициент.

Динамика длины вектора $\ell(t)$ описывается уравнением, в котором можно пренебречь вкладом от флуктуаций течения:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\Sigma}{2} \sin(2\psi), \quad (8)$$

где $\rho(t) = \ln(\ell(t)/\ell(0))$ — логарифмическое приращение расстояния между траекториями. Величина ляпуновской экспоненты $\lambda = \langle d\rho/dt \rangle_\sigma$ есть $\lambda = \lambda_c \psi_* \Sigma$, где λ_c — численная константа.

Пусть в начальный момент времени $\rho_0 = 0$ и $|\psi| \lesssim \psi_*$. В правой части уравнения (8) находится случайный процесс со временем корреляции порядка $(\psi_* \Sigma)^{-1}$. Значит, PDF для ρ принимает асимптотическую форму

$$\mathcal{P}_\ell(t, \rho) \sim \exp(-\tau S(\rho/\tau)) \quad (9)$$

на относительно больших временах $\tau \equiv \lambda t \gg 1$ [22, 32]. В (9) функция энтропии (она же функция Крамера) $S(\xi)$ является всюду выпуклой, см. [33]. Она принимает минимальное значение $S = 0$ в точке $\xi = 1$, что соответствует $\langle \rho(t) \rangle_\sigma = \tau$.

Поскольку частота переворотов ω мала по сравнению с Σ , разумно в качестве модельной задачи исследовать предел коротко коррелированных флуктуаций $\hat{\sigma}$, $\langle \zeta(0) \zeta(t) \rangle = 2D\delta(t)$. В этом пределе возможно подробно исследовать задачу [27] и найти численные константы $\omega_c \approx 0.201$, $\lambda_c \approx 0.365$. Наше дополнительное аналитическое и численное исследование задачи (см. Приложение) показало, что

$S(\xi) + \xi$ является четной функцией ξ , из чего следует $S'(0) = -1$. Аппроксимация

$$S(\xi) \approx S''(\xi - 1)^2/2 + S'''(\xi - 1)^3/6$$

хорошо приближает функцию в круге $|\xi - 1| \leq 1.5$ с $S''' \approx -0.207$ и $S'' = 1 + S'''/2$, а также согласуется со скоростью роста среднего квадрата расстояния $\langle \ell^2(t) \rangle$, которая может быть вычислена аналитически, см. [34].

Несмотря на то, что $\rho(t)$ в среднем растет, его динамика не монотонна. Действительно, в области $|\sin \psi| \gg \psi_*$, где поведение ψ проходит согласно (7), можно так же проинтегрировать (8):

$$\exp(\rho_1 - \rho_2) = \frac{\sin \psi_1}{\sin \psi_2}. \quad (10)$$

В ходе проворота ρ достигает локального минимума при $\psi = \pi/2$, а следующий локальный максимум соответствует $|\psi| \sim \psi_*$. Разность между максимумом и минимумом по порядку величины равна $\ln \psi_*^{-1} = -(1/3) \ln \varepsilon$. Важно отметить, что на распределение (9) PDF выходит на больших временах $\tau \gg (\ln \psi_*)^2$, когда уменьшение ρ в течение проворота много меньше ширины распределения. У совместной же функции распределения зависимость от ρ имеет вид, как в (9) для $\tau \gg 1$, если рассматривать ее на углах $|\sin \psi| \lesssim \psi_*$.

4. ПЕРЕМЕШИВАНИЕ СКАЛЯРА

Теперь исследуем роль молекулярной диффузии. Для этого рассмотрим распад начального условия согласно однородному уравнению (5). Изучим его физические свойства, выбрав пространственное распределение парной корреляционной функции (3) специфического вида: $\Theta = \exp(-r^2/2L^2)$. Такой вид позволяет существенно упростить математическое рассмотрение задачи, поскольку уравнение (5) сохраняет решение $\mathcal{F}$ с пространственным профилем гауссианы. Представим радиус-вектор в полярных координатах $\mathbf{r} = \{r \cos \phi, r \sin \phi\}$. Корреляционная функция имеет вид

$$\mathcal{F}(t, \mathbf{r}) = \frac{L^2}{L_+ L_-} \exp\left(-\frac{\tilde{\mathbf{r}}^T \hat{\Lambda} \tilde{\mathbf{r}}}{2}\right) \quad (11)$$

в любой момент времени, где матрица Λ — диагональная, $\Lambda_{xx} = L_+^{-2}$, $\Lambda_{yy} = L_-^{-2}$, при этом $L_+ \geq L_-$. Пространственное распределение (11) соответствует вытянутой по эллипсу кляксе $\vartheta_b(t, \mathbf{r}) \propto \exp(-\tilde{\mathbf{r}}^T \hat{\Lambda} \tilde{\mathbf{r}})$, где большая ось повернута на угол ψ относительно оси x . Введенный повернутый радиус-вектор $\tilde{\mathbf{r}} = \{r \cos(\delta\phi), r \sin(\delta\phi)\}$, $\delta\phi = \phi - \psi$. Характерная площадь кляксы $A = L_+ L_-$.

Система уравнений для размеров $L_{\pm}$ и угла ψ может быть получена из уравнения (5). Те же приближения, использованные при рассмотрении динамики лагранжевых траекторий, приводят к системе

$$\frac{d \ln L_{\pm}}{dt} = \pm \frac{\Sigma}{2} \sin(2\psi) + \frac{2\kappa}{L_{\pm}^2}, \quad (12)$$

$$\frac{d\psi}{dt} = -\Sigma \frac{L_+^2 \sin^2 \psi - L_-^2 \cos^2 \psi}{L_+^2 - L_-^2} + \frac{L_-^2}{L_+^2} + \varsigma. \quad (13)$$

В пределе существенного растяжения, $L_+ \gg L_-$, уравнение (13) динамики угла ψ сводится к (6). С начальными условиями $L_{\pm} = L$ и $\psi_0 = \pi/4$ в момент $t_0 = 0$ плотность распределения ρ получается сдвинутой по сравнению с (9),

$$\mathcal{P}(t, \rho) = \mathcal{P}_l(t, \rho + \ln \psi_*). \quad (14)$$

Мы предполагаем режим, в котором случайная компонента течения существенно важна, $\text{Re} \cdot \varepsilon^{1/3} \gg 1$, так что диффузия в (12) для динамики L_+ всегда пренебрежима. Тогда в пределе сильного растяжения, $L_+ \gg L_-$, система уравнений для угла ψ и логарифмического растяжения кляксы $\rho = \ln(L_+/L)$ совпадает с системой (6), (8), описывающей динамику лагранжевых траекторий.

Далее рассмотрим динамику наименьшего масштаба L_- . Сравнивая средний темп сжатия с диффузионным слагаемым в (12), находим диффузионный масштаб $r_{\kappa} = \sqrt{2\kappa/\lambda}$. Уравнение (12) можно переписать как

$$\partial_{\tau} \rho_- = \partial_{\tau} \rho - \exp(2(\rho_- - \ln(L/r_{\kappa}))), \quad (15)$$

где логарифмическая степень сжатия $\rho_- = \ln(L/L_-)$. До тех пор пока растяжение умеренное, динамика наименьшего масштаба L_- еще не подвержена влиянию диффузии, так что $\rho_- = \rho$. Площадь кляксы в этом режиме сохраняется, $A = L_+ L_-$. Молекулярная диффузия предотвращает неограниченное сжатие кляксы. Если случайная компонента течения относительно сильная, так что $L\psi_* \gg r_{\kappa}$ (т.е. $\text{Re} \cdot \varepsilon > 1$), меньший масштаб L_- прекращает снижаться спустя некоторое количество проворотов.

Если случайная компонента слаба, $L\psi_* < r_{\kappa}$ (так что $\text{Re} \cdot \varepsilon < 1$), диффузионный масштаб достигается в течение первого проворота. Согласно уравнению (10), сначала масштаб L_- опускается до $\sim L\psi_{\kappa} = (\text{Re} \cdot \varepsilon)^{1/6} r_{\kappa}$ спустя $\tau \sim \psi_*/\psi_{\kappa}$, где $\psi_{\kappa} = \text{Re}^{-1/3}$. Масштаб сжатия и площадь кляксы размываются и растут алгебраически с τ на промежуточных временах $\psi_*/\psi_{\kappa} < \tau < 1$, $L_- \sim \sqrt{\kappa t}$

и $A \sim \sqrt{\kappa} L \Sigma t^{3/2}$, так что L_- достигает r_{κ} при $\tau \sim 1$. Дальнейшая динамика L_- такая же в пределе $L\psi_* \gg r_{\kappa}$.

Чтобы провести усреднение по флуктуациям течения в (4), требуется учитывать совместную динамику логарифмов ρ, ρ_- и угла ψ . В области углов $|\sin \psi| \gg \psi_*$ шумом в уравнении Ланжевена (6) можно пренебречь, что делает уравнения движения детерминированными и позволяет их проинтегрировать, см. (7), (10):

$$\text{ctg} \psi - \frac{1}{\psi_*} = \Sigma(t^* - t), \quad \frac{\psi_*}{\sin \psi} = \frac{L_+}{L_*^+} = \frac{L_-^*}{L_-}, \quad (16)$$

где звездочка обозначает величину в момент времени $t = t^*$, когда $\psi \sim \psi_*$. Следуя за масштабом растяжения, наименьший масштаб достигает своего минимума при L_-^* при углах $|\psi| \sim \psi_*$ согласно (12). Несмотря на важность диффузии в минимуме L_- , где $L_-^* \sim r_{\kappa}$, ею можно пренебречь в последующем промежутке детерминированной динамики (16). Из этого рассуждения следует, что совместную плотность распределения можно представить как

$$\mathcal{P}(t, \rho, \rho_-, \psi) = \frac{\psi_*^2}{\sin^2 \psi} \mathcal{P}(t^*, \rho^*, \rho_-^*, \psi_*), \quad (17)$$

где t^*, ρ^*, ρ_-^* соотносятся с t, ρ, ρ_- , как в (16). Отметим, что на больших временах $\lambda t \gg 1$ плотность вероятности значений угла переходит в стационарное распределение $\mathcal{P}_{st}(\psi)$, тело которого локализовано на малых значениях $|\psi| \lesssim \psi_*$. Связь между масштабами сжатия и растяжения может быть выражена через их логарифмы:

$$\rho_-^* = \ln\left(\frac{L}{r_{\kappa}}\right) - \theta\left(\ln\left(\frac{L}{r_{\kappa}}\right) - \rho^*\right)\left(\ln\left(\frac{L}{r_{\kappa}}\right) - \rho^*\right), \quad (18)$$

где $\theta(\xi) = 1$ при $\xi > 0$ и $\theta(\xi) = 0$ в противном случае. Мы приходим к следующей оценке для (17):

$$\mathcal{P}(t, \rho^*, \rho_-^*, \psi_*) \sim \frac{1}{\psi_*} \mathcal{P}(t, \rho^*), \quad (19)$$

где форма $\mathcal{P}(t, \rho)$ приведена в уравнении (9) и ρ_-^* задается (18).

5. ОДНОТОЧЕЧНОЕ СРЕДНЕЕ В ЗАДАЧЕ РАСПАДА

В данном разделе будет проведено усреднение по статистике течения в (4),

$$\langle |\vartheta|^{\alpha} \rangle = \int \mathcal{P}(t, \rho, \rho_-, \psi) d\rho d\rho_- d\psi (\mathcal{F}(t, 0))^{\alpha/2}. \quad (20)$$

Выбранный пространственный профиль корреляционной функции (11) позволяет переписать выражение (20) в виде

$$\langle |\vartheta|^\alpha \rangle = C_\alpha L^\alpha \left\langle (L_+ L_-)^{-\alpha/2} \right\rangle_\sigma. \quad (21)$$

Сначала рассмотрим случай $\text{Re} \cdot \varepsilon \gg 1$, когда $\rho_\kappa = \ln(L/r_\kappa) + \ln \psi_* = \ln \sqrt{\text{Re} \cdot \varepsilon} > 1$, и $\alpha > 0$. Флуктуациями течения можно пренебречь на временах $\tau \lesssim 1$, когда эволюцию кляксы можно считать детерминированной и усреднение в (20) сводится к замене ρ, ρ_- и ψ на их значения. После этого, на больших временах $\tau \gg 1$, согласно уравнениям (18), (19) усреднение в (4) может быть сведено к интегрированию ($\rho' = \rho^* + \ln \psi_*$):

$$\langle |\vartheta|^\alpha \rangle = \int_0^\infty d\rho' \mathcal{P}_\ell(t, \rho') e^{-(\alpha/2)(\rho_\kappa - \rho') \theta(\rho_\kappa - \rho')}. \quad (22)$$

На начальных временах $\tau < \rho_\kappa$ интеграл в (22) определяется вкладом около $\rho' \approx \tau$, т.е. экспоненту в (22) можно заменить единицей, получив $\langle |\vartheta|^\alpha \rangle = C_\alpha$. В противоположном пределе больших времен $\tau \rightarrow \infty$ интеграл в (22) набирается на $\rho' \geq \rho_\kappa$, поэтому корреляционная функция является преобразованием Лапласа плотности распределения (9):

$$\begin{aligned} \langle |\vartheta|^\alpha \rangle &\sim e^{\alpha \rho_\kappa / 2} \int_{\rho_\kappa / \tau}^{+\infty} d\xi \exp(-\tau (S(\xi) + \alpha \xi / 2)) \sim \\ &\sim \left(\frac{L \psi_*}{r_\kappa} \right)^{\alpha/2} \exp(-q_\alpha \tau). \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь преобразование Лежандра функции энтропии $q_\alpha = \alpha \xi_\alpha / 2 + S(\xi_\alpha)$ по ξ_α определяется через уравнение $\partial_\xi S(\xi) = -\alpha/2$, которое возникает в ходе интегрирования (23) по методу перевала. Заметим, что $0 < \xi_\alpha < 1$, поэтому (23) применимо только на больших временах $\tau > \rho_\kappa / \xi_\alpha$, для которых диффузия важна в динамике скаляра. Следовательно, на промежуточных временах $\rho_\kappa < \tau < \rho_\kappa / \xi_\alpha$ одноточечное среднее определяется оптимальной флуктуацией, при которой $\rho_-(t)$ достигает диффузионного предела $\ln(L/r_\kappa)$ как раз к моменту τ , но диффузия еще не влияет на динамику, так что $L_+ L_- = L^2$. Соберем ответы для всех промежутков времени:

$$\langle |\vartheta|^\alpha \rangle \sim \begin{cases} 1, & \tau < \rho_\kappa, \\ e^{-\tau S(\rho_\kappa / \tau)}, & \rho_\kappa < \tau < \rho_\kappa / \xi_\alpha, \\ (L \psi_* / r_\kappa)^{\alpha/2} e^{-q_\alpha \tau}, & \rho_\kappa / \xi_\alpha < \tau. \end{cases} \quad (24)$$

Оптимальные флуктуации отображены схематически на рис. 1.

Согласно уравнению (23), оптимальная флуктуация удовлетворяет неравенству $\xi_\alpha \geq \rho_\kappa / \tau$. Это влечет за собой ограничение

$$\alpha < \alpha_{cr} - (2 - S''') \rho_\kappa / \tau < \alpha_{cr}. \quad (25)$$

Второе слагаемое здесь является отрицательной поправкой, записанной в линейном порядке разложения по $\rho_\kappa / \tau \ll 1$. Равенство $\alpha = \alpha_{cr}$ соответствует $\xi_\alpha = 0$, что дает критическое значение индекса $\alpha_{cr} = 2$ согласно установленным свойствам функции Крамера S , см. текст после (9). Если α превышает порог (25), то оптимальная флуктуация на временах $\tau > \rho_\kappa$ соответствует динамике, в которой диффузия не играет роли, поскольку $\rho^* = \ln(L/r_\kappa)$, что соответствует второй асимптотике в (24). В случае изотропного случайного течения аналогичные результаты были получены в работе [21] для предела коротко коррелированных во времени градиентов скорости $\hat{\sigma}$ и в [22] методом поиска оптимальной флуктуации. В частности, критический индекс $\alpha_{cr} = 2$ такой же, как и установленный в анизотропном случае.

Если $-1 < \alpha < 0$, то $q_\alpha < 0$, $\xi_\alpha > 1$, и оптимальная флуктуация соответствует $\rho = \tau$ при $\tau < \alpha \rho_\kappa / 2 q_\alpha$. Диффузия на этих временах еще не действует, так что выполняется первый режим в (24). После этого оптимальная флуктуация переходит на финальный линейный рост $\rho = \xi_\alpha \tau$, и одноточечное среднее начинает расти, так что выполняется третий режим (24).

Вернемся к случаю $\text{Re} \cdot \varepsilon < 1$ и $\alpha > 0$. Молекулярная диффузия становится существенной за первый акт проворота начиная со времени $\tau \gtrsim \psi_\kappa$, так что одноточечное среднее

$$\langle |\vartheta|^\alpha \rangle = C_\alpha / A^\alpha = C_\alpha (L / \sqrt{\kappa} \Sigma t^{3/2})^{\alpha/2}$$

снижается по порядку до $(L \psi_* / r_\kappa)^{\alpha/2}$ на временах

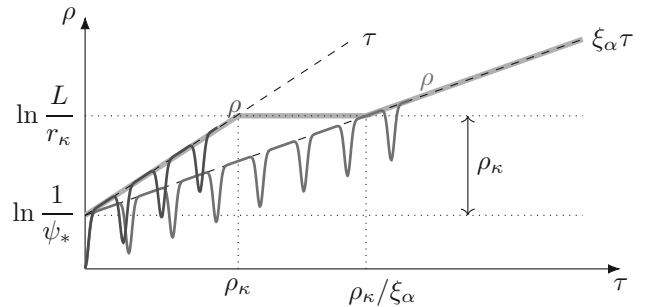


Рис. 1. Оптимальная флуктуация для (24) в случае $\alpha < \alpha_{cr}$. Коричневая кривая демонстрирует начальную асимптотику в (24), а зеленая кривая — заключительную. Жирная серая линия — конечные точки процесса $\rho(\tau)$ при оптимальных флуктуациях течения

$\tau \sim 1$. Для последующей эволюции применимо (22) и реализуется последняя асимптотика из (24).

6. ПОСТОЯННАЯ НАКАЧКА СКАЛЯРА

В случае постоянной возбуждения скаляра внешним источником f , см. (1), его распределение может быть представлено как совокупность клякс, которые были вброшены в систему накачкой в различные моменты времени и после чего эволюционировали. Одноточечная статистика скаляра по-прежнему остается гауссовой для фиксированной реализации случайного течения. Сохраним обозначение $\mathcal{F}(t, \mathbf{r})$ для частично усредненной корреляционной функции в распадной задаче, определим частично усредненную парную корреляционную функцию $\mathcal{G} = \langle \vartheta(t, 0) \vartheta(t, \mathbf{r}) \rangle_f$ в задаче с непрерывной накачкой. Для коротко коррелированного во времени источника f имеем связь в статистически стационарном пределе:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dt \mathcal{F}(t, \mathbf{r}). \quad (26)$$

Теперь $\langle \vartheta^2 \rangle_f = \mathcal{G}(0)$ в (4).

Обозначим как τ_F момент, когда L_- снижается до диффузионного масштаба r_κ в первый раз, т. е. когда $\rho = \rho_\kappa$. На временном промежутке $0 < \tau < \tau_F$ частично усредненное значение $\langle \vartheta^2 \rangle_f = 1$ в распадной задаче, а на больших временах $\tau > \tau_F$ это среднее быстро убывает. Возвращаясь к задаче с непрерывной накачкой, имеем $\langle \vartheta^2 \rangle_f = \tau_F$ для отдельной реализации потока. Из этого рассмотрения следует, что в случае слабых флуктуаций течения их роль несущественна для среднего $\langle |\vartheta|^\alpha \rangle$, поэтому рассмотрим предел $\text{Pe} \cdot \varepsilon \gg 1$. При произвольном α усреднение по статистике течения означает оптимизацию времени τ_F . Если ρ_κ велико, то средний квадрат $\langle \vartheta \rangle$ насыщается наиболее вероятными реализациями случайного течения,

$$\langle \vartheta^2 \rangle = \langle \tau_F \rangle_\sigma \approx \rho_\kappa = \frac{1}{2} \ln \frac{DL^2}{\kappa}. \quad (27)$$

Для произвольной степени α

$$\frac{\langle |\vartheta|^\alpha \rangle}{\rho_\kappa^{\alpha/2}} = C_\alpha \int_0^\infty d\tau_F \exp \left(-\tau_F S \left(\frac{\rho_\kappa}{\tau_F} \right) + \frac{\alpha}{2} \ln \frac{\tau_F}{\rho_\kappa} \right). \quad (28)$$

Если степень достаточно мала, $\tilde{\alpha} \equiv \alpha/S''\rho_\kappa \ll 1$, то при интегрировании достаточно разложить функцию энтропии в квадратичном порядке у минимума выражения. Статистика скаляра незначительно отличается от гауссовой в этом пределе. В другом случае, при $\tilde{\alpha} \gg 1$, интегрирование задается разложением функции энтропии в окрестности нуля,

так что оптимальное время $\tau_F = \alpha/2S(0)$. Получаем асимптотики

$$\frac{\langle |\vartheta|^\alpha \rangle}{(\rho_\kappa)^{\alpha/2}} = \begin{cases} C_\alpha \exp(\alpha^2/8S''\rho_\kappa), & \tilde{\alpha} \ll 1, \\ \sqrt{\text{Pe} \cdot \varepsilon} C_{2\alpha} E^\alpha, & \tilde{\alpha} \gg 1, \end{cases} \quad (29)$$

где $E = \sqrt{8\rho_\kappa S(0)}$. Это означает, что вероятность сильных отклонений определяется экспоненциальным хвостом функции распределения:

$$\mathcal{P}(\vartheta) \sim \frac{\sqrt{\text{Pe} \cdot \varepsilon}}{E\sqrt{\langle \vartheta^2 \rangle}} \exp \left(-\frac{|\vartheta|}{E\sqrt{\langle \vartheta^2 \rangle}} \right). \quad (30)$$

Промежуточная гауссова асимптотика при $\tilde{\alpha} \ll 1$ была найдена в [35]. Однако моменты высокого порядка $\tilde{\alpha} \gg 1$ определяются реализациями случайного течения, которые препятствуют сильному растяжению кляксы. Шум ζ в динамике кляксы выполняет роль силы, побуждающей проходить точки $\sin \psi = 0$, тем самым не давая кляксе растягиваться. Представленное рассмотрение для одноточечных средних обобщает рассмотрение [24] для случая статистически изотропного течения на задачу с наличием сильного постоянного сдвига.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что процесс перемешивания пассивного скаляра в сильном сдвиговом течении с гладкой случайной компонентой скорости наследует многие свойства задачи в статистически изотропном случайном гладком течении. Различие проявляется вследствие анизотропии, возникающей с постоянным сдвигом. Система описывается параметрами интенсивности случайной компоненты в течении ε и числом Пекле Pe . Случайная компонента физически существенна при $\text{Pe} \cdot \varepsilon^{1/3} > 1$. Наибольший интерес представляет собой случай, когда она является достаточно сильной, $\text{Pe} \cdot \varepsilon \gg 1$, так что клякса, попав в течение, проходит через несколько актов проворота, перед тем как диффузия начинает перемешивать скаляр в ней. В этом пределе статистические свойства скаляра определяются через функцию энтропии, которая описывает статистику расходящихся в потоке лагранжевых траекторий. Добавление слабой случайной компоненты позволяет существенно ускорить наступление процесса перемешивания: если в стационарном сдвиговом потоке молекулярная диффузия вступает в размешивание кляксы размера l на временах порядка $(\Sigma^2 \kappa / l^2)^{-1/3}$, то в системе со слабым шумом это время уменьшается до $\ln(\text{Pe} \cdot \varepsilon) / \lambda$, т. е. в $\sim (\text{Pe} \cdot \varepsilon)^{1/3} / \ln(\text{Pe} \cdot \varepsilon)$ раз.

Отметим, что геометрия случайной компоненты скорости имеет принципиально важную роль. Главный вклад в ускорение процесса перемешивания вносит производная вдоль линий тока среднего течения от компоненты скорости v_y , направленной нормально к ним, $\sigma_{yx} = \partial_x v_y$, см. (6). В результате совместного действия постоянного сдвига и этой случайной компоненты ляпуновская экспонента потока становится отличной от нуля. Напротив, в [36] был рассмотрен случай, когда случайная компонента есть только в $\partial_z v_x$, где z — третья координата, а $v_y = 0$. В этом случае процесс перемешивания по-прежнему имеет алгебраическую зависимость на больших временах. То же замечание касается и других подобных моделей, в одной из которых единственная ненулевая компонента скорости имеет зависимость $v_x(t, y)$ со случайной компонентой во времени и пространстве [37]. Квадрат расстояния между двумя лагранжевыми траекториями растет по алгебраическому закону, т. е. ляпуновская экспонента в этой модели равна нулю. Это сравнение показывает обоснованность выбранной нами модели, ухватывающей главный эффект, производимый турбулентными флуктуациями.

Благодарности. Авторы благодарны В. В. Лебедеву и И. В. Колоколову за важные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена в лаборатории «Современная гидродинамика», созданной в рамках гранта Министерства науки и высшего образования РФ 075-15-2022-1099, и поддержана средствами госзадания 0029-2019-0003.

ПРИЛОЖЕНИЕ.

АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА–ПЛАНКА

Рассмотрим уравнение Фоккера–Планка для совместной функции распределения $\mathcal{P}_\ell(\rho, \psi)$, описывающей статистику лагранжевых траекторий ℓ в терминах ρ, ψ , в пределе коротко коррелированной по времени случайной компоненты поля скорости ς :

$$\partial_t \mathcal{P}_\ell = -\frac{\Sigma \sin(2\psi)}{2} (\partial_\rho - 1) \mathcal{P}_\ell + \hat{\mathcal{L}} \mathcal{P}_\ell, \quad (31)$$

которое выполняется в пределе $\varepsilon \ll 1$, где

$$\hat{\mathcal{L}} = \Sigma \sin \psi \partial_\psi \sin \psi + D \partial_\psi^2.$$

Преобразование Фурье относительно переменной ρ уравнения (31) на значении «частоты» $-i\eta$ имеет вид

$$\partial_t \tilde{\mathcal{P}}_\ell = \left(-\frac{\Sigma(\eta - 1)}{2} \sin(2\psi) + \hat{\mathcal{L}} \right) \tilde{\mathcal{P}}_\ell. \quad (32)$$

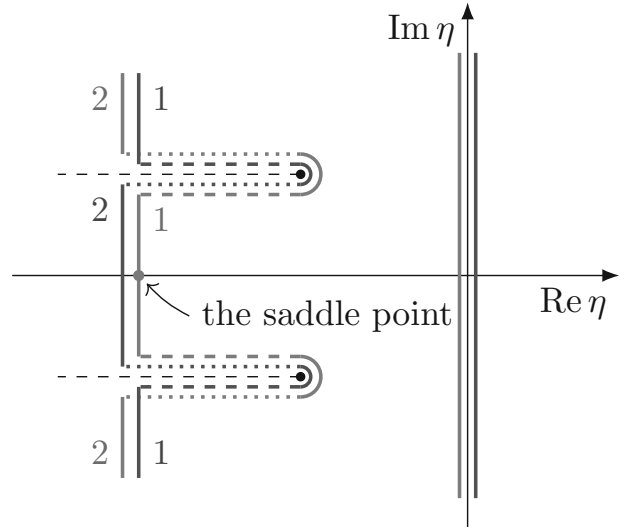


Рис. 2. Контуры интегрирования при обратном преобразовании Фурье для нулевого и первого собственных значений, исходные обозначены непрерывными синей и красной линиями. Черными штриховыми линиями обозначены разрывы

Поскольку мы интересуемся асимптотическим поведением $\mathcal{P}_\ell$ на больших временах, полезно рассмотреть задачу о спектре линейного оператора в правой части (32). Для сопряженной задачи оператор $\hat{\mathcal{L}}^T(\psi) = \hat{\mathcal{L}}(-\psi)$, что приводит к симметрии собственных значений γ :

$$\gamma(\eta) = \gamma(2 - \eta).$$

При взятии обратного преобразования Фурье из этого следует симметрия функции энтропии S , о которой речь идет ниже (9) в разд. 3. Поскольку оператор $\hat{\mathcal{L}}$ веществен в ψ -представлении, также имеем симметрию $\gamma(\eta^*) = (\gamma(\eta))^*$. Мы будем сортировать собственные значения в порядке уменьшения значения действительной части. Нулевое собственное значение $\gamma_0(\eta) = -\lambda q_{2\eta}$ является невырожденным, вещественным при $\text{Im } \eta = 0$ и обладает наибольшей действительной частью в окрестности этой прямой. Согласно нашему численному анализу, оно может быть хорошо приближено разложением

$$q_{2\eta} \approx \frac{\tilde{\eta}(1 - Q_1 \tilde{\eta})}{2}, \quad Q_1 = 0.026, \quad \tilde{\eta} = 1 - (\eta - 1)^2, \quad (33)$$

в области $|\eta - 1| \leq 2.5$. Обратное преобразование Фурье $\exp(-q_{2\eta} \tau)$ приводит к функции Крамера (9), у которой $S'''(1) = -0.207$, см. абзац после (9). В пределе больших $|\eta| \gg 1$ имеем асимптотическое поведение $q_{2\eta} = -Q_2 |\eta|^{4/3}$, где $Q_2 \approx 0.32$.

В комплексной плоскости переменной η имеются точки ветвления, при которых два собственных значения становятся равными. В частности, нулевое

собственное значение сравнивается с первым в точках $\eta - 1 \approx \pm 2.1 \pm 1.6i$, а следующие два значения с наибольшими действительными частями, $\gamma_1(\eta_*)$ и $\gamma_2(\eta_*)$, сравниваются в точках $\eta_* - 1 \approx \pm 5.0$. В окрестности каждой сингулярности соответствующие собственные числа относятся к двум листам у корневой особенности. Важно, что при взятии обратного преобразования Фурье (32) эти точки ветвления не вносят вклада в пределе больших $|\rho|/\tau$. Действительно, предположим, что ρ положительно, и деформируем оба контура интегрирования для слагаемых с этими собственными значениями, как на рис. 2. Подынтегральные функции с предэкспонентами равны друг другу на штриховых частях контуров, но интегрирование проводится в противоположных направлениях, так что результаты интегрирования вдоль каждой штриховой части контура сокращают друг друга. Точно так же происходит сокращение пунктирных частей контуров разного цвета. Дальше можно объединить части контуров «1» и «2» в два соединенных контура, где подынтегральные функции аналитически продолжены с вещественной оси. Таким образом заключаем, что если сдвигать контуры интегрирования совместно в комплексной плоскости, то можно пренебречь этими точками ветвления.

Следовательно, на больших временах результат обратного преобразования Фурье задается поведением нулевого собственного значения и собственной функции в окрестности перевальной точки, которая находится на вещественной оси, что обеспечивает положительность плотности $\mathcal{P}_\ell$. Перевальная точка является решением уравнения $\eta = -\partial_\xi S(\xi)$, где $\xi = \rho/\tau$. Зная $q_{2\eta}$, можно восстановить функцию энтропии. Результат согласуется со статистикой, полученной в результате численной симуляции ланжевеновских уравнений (6), (8). Отметим, что $S(\xi) \approx 3.2\xi^4$ на больших $|\xi| \gg 1$. Такое очень быстрое затухание функции распределения выполняется вплоть до $|\xi| \sim \varepsilon^{-2/3}$, после чего $S \sim (\rho/Dt)^2$, что обеспечивается членом $\sim D\partial_\rho^2 \mathcal{P}_\ell$, которым пренебрегли в правой части (31).

Значение экспоненты $q_{2\eta}$ (33) можно найти аналитически при $\eta = 2$ [34]. Для этого рассмотрим динамику $\langle \ell^2(t) \rangle$, которую можно связать с остальными квадратичными средними. Для случая коротко коррелированного во времени процесса $\varsigma(t)$ из уравнения $d\ell/dt = (\hat{\Sigma} + \hat{\sigma})\ell$ получаем

$$\frac{d}{dt} \langle \ell_x^2 \rangle = 2\Sigma \langle \ell_x \ell_y \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \ell_y^2 \rangle = 2D \langle \ell_x^2 \rangle,$$

$$\frac{d}{dt} \langle \ell^2 \rangle = 2[\Sigma \langle \ell_x \ell_y \rangle + D \langle \ell_x^2 \rangle], \quad \frac{d}{dt} \langle \ell_x \ell_y \rangle = \Sigma \langle \ell_y^2 \rangle.$$

Динамическая система в пределе сильного сдвига эквивалентна рассмотренной в [34], полученной в случае изотропных коротко коррелированных флуктуаций $\hat{\sigma}(t)$. Из этой системы можно прийти к выражению ляпуновской экспоненты для динамики $\langle \ell^2 \rangle$ как корню характеристического уравнения:

$$\langle \ell^2(t) \rangle \propto \exp(-q_4 \tau), \quad -(\lambda_c q_4)^3 = 4. \quad (34)$$

Вычисление $\langle \ell^2(t) \rangle$ с использованием приближенно-го выражения для функции Крамера S , приведенного в статье, дает такой же результат с относительной точностью 3%.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Falkovich, K. Gawedzki, and M. Vergassola, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 913 (2001).
2. H. Xia, M. Shats, and G. Falkovich, *Phys. Fluids* **21**, 125101 (2009).
3. J. Laurie, G. Boffetta, G. Falkovich, I. Kolokolov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 254503 (2014).
4. I. Kolokolov and V. Lebedev, *Phys. Rev. E* **93**, 033104 (2016).
5. I. Kolokolov and V. Lebedev, *J. Fluid Mech.* **809**, R2 (2016).
6. A. Frishman and C. Herbert, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 204505 (2018).
7. A. N. Doludenko, S. V. Fortova, I. V. Kolokolov, and V. V. Lebedev, *Phys. Fluids* **33**, 011704 (2021).
8. A. Groisman and V. Steinberg, *Nature* **405**, 53 (2000).
9. A. Groisman and V. Steinberg, *Nature* **410**, 905 (2001).
10. V. Steinberg, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **53**, 27 (2021).
11. G. Falkovich and N. Vladimirova, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 164501 (2018).
12. H. Feng, M. G. Olsen, Y. Liu, R. O. Fox, and J. C. Hill, *AIChE J.* **51**, 2649 (2005).
13. T. Burghellea, E. Segre, I. Bar-Joseph, A. Groisman, and V. Steinberg, *Phys. Rev. E* **69**, 066305 (2004).
14. Y. Amarouchene and H. Kellay, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 214504 (2004).

15. Y. Jun and V. Steinberg, *Phys. Fluids* **22**, 123101 (2010).
16. А. М. Обухов, Изв. АН СССР, сер. геогр. и геофиз. **13**(1), 58 (1949).
17. S. Corrsin, *J. App. Phys.* **22**, 469 (1951).
18. G. K. Batchelor, *J. Fluid Mech.* **5**, 113 (1959).
19. K. R. Sreenivasan, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **116**, 18175 (2019).
20. D. A. Donzis, K. Sreenivasan, and P. Yeung, *Flow. Turb. Comb.* **85**, 549 (2010).
21. D. Son, *Phys. Rev. E* **59**, R3811 (1999).
22. E. Balkovsky and A. Fouxon, *Phys. Rev. E* **60**, 4164 (1999).
23. S. Vergeles, *J. Exp. Theor. Phys.* **102**, 685 (2006).
24. B. I. Shraiman and E. D. Siggia, *Phys. Rev. E* **49**, 2912 (1994).
25. M. Souzy, I. Zaier, H. Lhuissier, T. Le Borgne, and B. Metzger, *J. Fluid Mech.* **838**, R3 (2018).
26. A. Celani, M. Cencini, M. Vergassola, E. Villermaux, and D. Vincenzi, *J. Fluid Mech.* **523**, 99 (2005).
27. K. Turitsyn, *J. Exp. Theor. Phys.* **105**, 655 (2007).
28. D. E. Smith, H. P. Babcock, and S. Chu, *Science* **283**, 1724 (1999).
29. Y. Liu and V. Steinberg, *Europhys. Lett.* **90**, 44005 (2010).
30. M. Šiler, L. Ornigotti, O. Brzobohatý, P. Jákľ, A. Ryabov, V. Holubec, P. Zemánek, and R. Filip, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 230601 (2018).
31. M. Chertkov, I. Kolokolov, V. Lebedev, and K. Turitsyn, *J. Fluid Mech.* **531**, 251 (2005).
32. A. Puliafito and K. Turitsyn, *Phys. D: Nonlin. Phenomena* **211**, 9 (2005).
33. R. S. Ellis, *Entropy, Large Deviations, and Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (1985).
34. V. Klyatskin, W. Woyczynski, and D. Gurarie, in *Stochastic Modelling in Physical Oceanography*, Springer (1996), pp. 221–269.
35. I. Kolokolov and N. T. Trung, *Phys. Lett. A* **376**, 1836 (2012).
36. A. J. Majda, *Phys. Fluids A: Fluid Dyn.* **5**, 1963 (1993).
37. M. Avellaneda and A. J. Majda, *J. Stat. Phys.* **69**, 689 (1992).

ЭВОЛЮЦИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛНОВЫХ ИМПУЛЬСОВ В ТЕОРИИ УРАВНЕНИЯ СИНУС-ГОРДОН

А. М. Камчатнов^{а*}

^а *Институт спектроскопии Российской академии наук
108840 Москва, Троцк, Россия*

Поступила в редакцию 27 декабря 2022 г.,
после переработки 27 декабря 2022 г.
Принята к публикации 26 января 2023 г.

Дано решение модуляционных уравнений Уизема, описывающих эволюцию огибающих однофазных периодических волн, подчиняющихся уравнению синус-Гордон. Методом годографа задача сведена к линейному уравнению в частных производных и описан класс решений этого уравнения с разделяющимися переменными. Теория иллюстрируется примером, в котором получено полное аналитическое решение задачи о самосжатии нелинейного волнового пакета, которое сопровождается уходом волн из области нелинейных колебаний.

DOI: 10.31857/S0044451023050127
EDN: BFLYCL

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление модуляционной неустойчивости нелинейных волн было открыто независимо в нескольких различных физических контекстах: как самофокусировка интенсивных пучков света, распространяющихся в нелинейной среде [1–3], как разбиение газа ленгмюровских плазмонов на отдельные сгустки [4, 5], как самосжатие волновых пакетов для волн в оптике [6] и на глубокой воде [7, 8]. Если начальное распределение физических параметров волны промодулировано достаточно плавными функциями, то в главном приближении динамика модуляций описывается уравнениями гидродинамического типа, для решения которых могут быть использованы методы газовой динамики. Первые примеры такого подхода были даны в теории самофокусировки, когда эволюция пучка света описывается фокусирующим нелинейным уравнением Шредингера, так что модуляционными параметрами служат интенсивность света и поперечное волновое число световой волны, которые подчиняются уравнениям геометрической оптики, эквивалентным гидродинамическим уравнениям для волн на «опрокинутой мелкой воде». Для этого случая В. И. Таланов нашел ре-

шение для пучка с параболическим начальным профилем интенсивности [9], а С. А. Ахманов, А. П. Сухоруков, Р. В. Хохлов [10] — для пучков с начальным профилем интенсивности вида $\text{ch}^{-2}(x)$. В работах [11, 12] аналогичный подход был сформулирован независимо от теории НУШ, но также в приближении умеренной амплитуды волны, и в результате модуляционная гидродинамическая система была сведена методом годографа к линейному уравнению эллиптического типа. Примеры решений этого уравнения, описывающих самофокусировку пучков света и самокомпрессию импульсов, были даны в [13] и другие многочисленные примеры можно найти в книге [14].

Естественно, эти решения, предполагающие плавную модуляцию волны, справедливы лишь до момента фокусировки. Кроме того, они неустойчивы относительно малых возмущений, нарушающих плавность профиля волны. Еще в работах [15, 16] было замечено, что в теории фокусирующего НУШ локализованное начальное возмущение однородной плоской волны ведет к образованию расширяющейся со временем промодулированной волновой структуры. Применение модуляционной теории Уизема [17–20] к описанию эволюции этой структуры показало [21–23], что фронт неустойчивости движется с минимальной групповой скоростью действительной ветви закона дисперсии, и этот результат был подтвержден в [24] в рамках метода обратной задачи рассеяния для НУШ. Обобщение

* E-mail: kamch@isan.troitsk.ru

[25] этой теории на неоднородные эволюционирующие волны позволило найти закон движения границ области нелинейных осцилляций для произвольных плавных начальных профилей неустойчивого импульса.

Описанные выше результаты основаны на том, что в главном приближении волна является линейной, так что нелинейность вносит лишь небольшую, зависящую от амплитуды, поправку в закон дисперсии. В геометро-оптическом приближении это эквивалентно зависимости показателя преломления среды от интенсивности света, и тогда уравнения геометрической оптики для пучков света, распространяющихся в фокусирующей среде, превращаются в гидродинамические уравнения для «опрокинутой мелкой воды», простота которых позволяет использовать хорошо разработанные методы газовой динамики. Ситуация меняется, однако, в случае известного нелинейного уравнения Клейна-Гордона

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} + U'(\varphi) = 0, \quad U' = \frac{dU}{d\varphi}, \quad U'(0) = 0, \quad (1)$$

имеющего многочисленные приложения к физическим задачам, особенно в частном случае так называемого уравнения синус-Гордон с $U'(\varphi) = \sin \varphi$ (см., например, [26, 27] и имеющиеся там ссылки). Это уравнение имеет решения в виде нелинейных периодических волн $\varphi = \varphi(A, kx - \omega t)$, для которых зависимость частоты ω от амплитуды волны A уже не может считаться малой поправкой. В промодулированной волне ее амплитуда A и фазовая скорость $V = \omega/k$ становятся медленными функциями координаты x и времени t , мало изменяющимися на одной длине волны и за один период. Соответствующие модуляционные уравнения, определяющие динамику A и V , были получены Уиземом [17, 18]. В работе [28] на основе метода усреднения Боголюбова-Митропольского было указано, что уравнения квазиклассической асимптотики для (1), совпадающие с уравнениями Уизема, эквивалентны уравнениям релятивистской гидродинамики (см. также обзор [29]). Существенно, что в наиболее интересном случае уравнения синус-Гордон эта динамика снова оказывается модуляционно неустойчивой, однако как ввиду сложности уравнения состояния, отвечающего закону дисперсии $\omega = \omega(k, A)$ для волн в «эффективной релятивистской материи», так и сложности уравнений релятивистской гидродинамики, задача об эволюции нелинейных волновых пакетов в теории уравнения синус-Гордон пока детально не исследовалась.

Целью настоящей работы является развитие метода решения модуляционных уравнений Уизема для однофазных периодических волн, эволюция которых подчиняется уравнению синус-Гордон. Ранее уравнения релятивистской гидродинамики изучались в теории множественного рождения частиц при ультрарелятивистских столкновениях ядер и нуклонов [30–33]. Мы покажем, что развитые в этих работах методы, использующие крайне простое уравнение состояния ультрарелятивистской материи $p = e/3$ (p — давление, e — плотность энергии), могут быть модифицированы применительно к существенно более сложному случаю уравнения синус-Гордон. В результате будет выведено линейное уравнение в частных производных, определяющее решение уравнений релятивистской гидродинамики в методе годографа, и описан класс решений этого уравнения с разделяющимися переменными. Теория будет проиллюстрирована примером самосжатия нелинейного волнового пакета, когда его эволюция демонстрирует уход волн из области нелинейных осцилляций через малоамплитудный край этой области.

2. УРАВНЕНИЯ УИЗЕМА

Приведем здесь основные соотношения модуляционной теории Уизема [17, 18] для нелинейного уравнения Клейна-Гордона (1). Легко видеть, что это уравнение имеет решения в виде бегущей волны $\varphi = \varphi(\xi)$, $\xi = x - Vt$, где $\varphi(\xi)$ определяется неявно уравнением

$$\xi - \xi_0 = \sqrt{\frac{V^2 - 1}{2}} \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{A - U(\varphi)}}, \quad (2)$$

так что V и постоянная интегрирования A являются постоянными параметрами, $\varphi(\xi_0) = \varphi_0$, и переменная φ осциллирует между двумя корнями уравнения $A - U(\varphi) = 0$ в интервале положительности подкоренного выражения. Следуя Уизему [17, 18], мы определяем функцию

$$W(V, A) = \sqrt{2(V^2 - 1)} \oint \sqrt{A - U(\varphi)} d\varphi \equiv \sqrt{V^2 - 1} G(A), \quad (3)$$

где интеграл берется по контуру вокруг указанного интервала положительности подкоренного выражения. Тогда длина волны найденного периодического решения выражается формулой

$$L = \frac{\partial W}{\partial A} = \sqrt{V^2 - 1} G'(A). \quad (4)$$

Мы определяем волновое число k как величину, обратную длине волны, $k = 1/L$, так что $k^2(V^2 - 1) = (G')^{-2}$, и получаем для частоты $\omega = kV$ закон дисперсии

$$\omega^2 = k^2 + (G'(A))^{-2}, \quad (5)$$

существенным образом зависящий от амплитуды A . Групповая скорость определяется выражением

$$v = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_A = \frac{k}{\omega} = \frac{1}{V}. \quad (6)$$

В промодулированной волне параметры V и A становятся медленными функциями координаты x и времени t , и их эволюция подчиняется модуляционным уравнениям Уизема [17, 18], которые могут быть записаны в наших обозначениях в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{kV}{V^2 - 1} + A \right)_t + \left(\frac{kVW}{V^2 - 1} \right)_x &= 0, \\ \left(\frac{kVW}{V^2 - 1} \right)_t + \left(\frac{kV^2W}{V^2 - 1} - A \right)_x &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Для перехода к релятивистской интерпретации этих уравнений удобно исключить из них W и V с помощью формул (3) и (6), и тогда мы получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{G/G'}{1 - v^2} + A - \frac{G}{G'} \right)_t + \left(\frac{(G/G')v}{1 - v^2} \right)_x &= 0, \\ \left(\frac{(G/G')v}{1 - v^2} \right)_t + \left(\frac{(G/G')v^2}{1 - v^2} - A + \frac{G}{G'} \right)_x &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Линеаризация этих уравнений относительно малых отклонений от постоянных значений A и v дает характеристические скорости

$$v_{\pm} = \frac{v \pm c}{1 \pm vc}, \quad (9)$$

где c определяется выражением

$$c^2 = -\frac{GG''}{(G')^2}. \quad (10)$$

В случае положительности этого выражения формулы (9) имеют простой физический смысл: они дают скорости распространения звукового сигнала со звуковой скоростью c по или против течения «среды», движущейся со скоростью v , так что в лабораторной системе отсчета скорость сигнала равна релятивистской сумме скоростей.

Уравнения (8) могут быть преобразованы к диагональной форме

$$\frac{\partial r_{\pm}}{\partial t} + v_{\pm} \frac{\partial r_{\pm}}{\partial x} = 0 \quad (11)$$

введением римановых инвариантов

$$r_{\pm} = \int \frac{v}{1 - v^2} \pm \int \frac{cG'}{G} dA, \quad (12)$$

что существенно упрощает решение задач в случае вещественности скорости звука c (положительности выражения в правой части (10)). Нас, однако, будет интересовать противоположный случай мнимой «скорости звука» c , для чего необходимо обсудить более детально свойства релятивистской гидродинамики для модели синус-Гордона.

3. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ГИДРОДИНАМИКА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА–ГОРДОНА

Еще Уизем в своей основополагающей работе [17] заметил, что процедура усреднения законов сохранения волнового движения по быстрым осцилляциям аналогична переходу от микроскопического описания движения среды в статистической механике к ее усредненному гидродинамическому описанию, справедливому при условии малости градиентов физических параметров, характеризующих среду. В нашем случае такими параметрами служат A и V , уравнение (1) релятивистски инвариантно, так что естественно ожидать, что после усреднения законов сохранения мы должны прийти к уравнениям релятивистской гидродинамики. В рамках асимптотического метода ВКБ это было показано в работе [28]. Однако для записи уравнений Уизема (8) в форме уравнений релятивистской гидродинамики удобнее исходить из закона сохранения энергии-импульса в релятивистском течении (см. [34]):

$$\frac{\partial T^{00}}{\partial t} + \frac{\partial T^{10}}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T^{10}}{\partial t} + \frac{\partial T^{11}}{\partial x} = 0, \quad (13)$$

где

$$T^{ij} = wu^i u^j - pg^{ij}, \quad i, j = 1, 2, \quad (14)$$

— тензор энергии импульса в двумерном пространстве Минковского с метрикой

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$w = e + p$ — тепловая функция на единицу объема, e — плотность энергии, p — давление, u^i — двумерный вектор «4-скорости». Для отождествления уравнений Уизема (8) с уравнениями (13) мы вводим стандартным образом 4-вектор u^i :

$$u^0 = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}, \quad u^1 = \frac{v}{\sqrt{1 - v^2}}, \quad (16)$$

и тогда легко видеть, что уравнения (8) и (13) совпадают, если

$$\begin{aligned} T^{00} &= \frac{w}{1-v^2} - p = \frac{G/(2G')}{1-v^2} + \frac{A}{2} - \frac{G}{2G'}, \\ T^{10} &= T^{01} = \frac{wv}{1-v^2} = \frac{(G/(2G'))v}{1-v^2}, \\ T^{11} &= \frac{wv^2}{1-v^2} + p = \frac{G/(2G')}{1-v^2} - \frac{A}{2} + \frac{G}{2G'}, \end{aligned} \quad (17)$$

где мы поделили для дальнейшего удобства уравнения (8) на 2. Отсюда следует связь амплитуды волны A с термодинамическими функциями эффективной материи, подчиняющейся гидродинамическим уравнениям (13):

$$e = \frac{A}{2}, \quad p = \frac{G}{2G'} - \frac{A}{2}, \quad w = e + p = \frac{G}{2G'}. \quad (18)$$

Существенно, что давление p зависит только от плотности энергии e . Это означает, что масса частиц эффективной материи пренебрежимо мала, хотя уравнение состояния $p = p(e)$ определяется существенно более сложной формулой, чем обычно предполагаемое уравнение состояния $p = e/3$ для ультрарелятивистской материи (см. [30–33]). Легко видеть, что выражение (10) для скорости звука можно записать в стандартном виде

$$c^2 = \frac{dp}{de}. \quad (19)$$

Температуру T и плотность энтропии σ эффективной материи можно определить следующим образом. В случае безмассовых частиц химический потенциал равен нулю, так что тепловая функция выражается формулой $w = T\sigma$, а из соотношения $dw = Td\sigma + dp = d(T\sigma)$ следует $dp = \sigma dT$ (см. [35]). Следовательно, квадрат скорости звука можно записать двумя способами: из (10) и (18) находим

$$c^2 = -w \frac{d^2 G/de^2}{dG/de},$$

а из формулы (19) с учетом $dp = \sigma dT = (w/T)dT$ имеем

$$c^2 = \frac{w}{T} \frac{dT}{de}.$$

Сравнение этих двух выражений дает формулы

$$T = \gamma \left(\frac{dG}{de} \right)^{-1}, \quad \sigma = \frac{1}{\gamma} G(e), \quad (20)$$

где постоянный множитель γ имеет в обеих формулах одно и то же значение. Отсюда следует соотношение

$$d\sigma = \frac{1}{\gamma} \frac{dG}{de} de = \frac{de}{T}, \quad (21)$$

согласующееся со стандартным термодинамическим определением энтропии.

В переменных T, σ, u^i гидродинамические уравнения можно записать в особенно простом виде. Замечаем, что формулы для волнового числа $k = 1/L$ и частоты $\omega = kV = k/v$ переходят в

$$\begin{aligned} k &= 2u^1 \left(\frac{dG}{de} \right)^{-1} = \frac{2}{\gamma} u^1 T, \\ \omega &= k \frac{u^0}{u^1} = \frac{2}{\gamma} u^0 T. \end{aligned} \quad (22)$$

Следовательно, следующий из уравнений (7) закон сохранения числа волн (см. [17, 18])

$$k_t + \omega_x = 0 \quad (23)$$

переходит в

$$(u^1 T)_t + (u^0 T)_x = 0. \quad (24)$$

Отметим, что это соотношение было получено И. М. Халатниковым [31] из уравнений (13) для любого одномерного течения, что доказывает его потенциальность. В теории Уизема уравнение (23) следует из того, что волновое число и частота определены как производные фазы: $k = \theta_x, \omega = -\theta_t$. Как мы видим, обе картины — модуляционная уиземовская и релятивистская гидродинамическая — математически согласованы друг с другом, differing лишь обозначениями и физическим смыслом переменных.

Еще одно уравнение легко получаем из формулы

$$\frac{\partial(wu^i)}{\partial x^i} - u^i \frac{\partial p}{\partial x^i} = 0, \quad (25)$$

являющейся следствием уравнений (13), (14) (см. формулу (134.5) и задачу 2 в §134 книги [34]). Подстановка в нее $w = T\sigma, dp = \sigma dT$ мгновенно дает уравнение

$$\frac{\partial(\sigma u^0)}{\partial t} + \frac{\partial(\sigma u^1)}{\partial x} = 0, \quad (26)$$

выражающее сохранение энтропии, то есть адиабатичность течения.

Конкретизируем эти соотношения для уравнения синус-Гордон, когда в (1)

$$U'(\varphi) = \sin \varphi, \quad U(\varphi) = 1 - \cos \varphi. \quad (27)$$

В этом случае интеграл в (2) сводится к эллиптическому интегралу первого рода и его обращение дает периодическое решение в явном виде

$$\begin{aligned} \varphi &= 2 \arcsin \left[\sqrt{e} \operatorname{sn} \left(\frac{\xi - \xi_0}{\sqrt{V^2 - 1}}, e \right) \right] = \\ &= 2 \arcsin \left[\sqrt{e} \operatorname{sn} \left(\frac{v(x - x_0) - t}{\sqrt{1 - v^2}}, e \right) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

При $e \rightarrow 1$ это решение переходит в известное решение уравнения синус-Гордон в виде «кинка»,

$$\varphi = 2 \arcsin \left[\sqrt{e} \operatorname{th} \left(\frac{v(x - x_0) - t}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \right], \quad (29)$$

то есть волны, переходящей от значения $\varphi = -\pi$ при $x \rightarrow -\infty$ к значению $\varphi = \pi$ при $x \rightarrow +\infty$. Вычисление интеграла в (3) с помощью подстановки $\sin(\varphi/2) = \sqrt{e} \sin \psi$ дает

$$\begin{aligned} G(e) &= 2\sqrt{2} \int_{-\varphi_0}^{\varphi_0} \sqrt{2e - 1 + \cos \varphi} d\varphi = \\ &= 16\{E(e) - (1 - e)K(e)\}, \end{aligned} \quad (30)$$

где $K(e), E(e)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода, соответственно, определенные здесь согласно справочнику [36] ($\pm\varphi_0$ являются нулями подынтегрального выражения). Выбирая для постоянной γ в (20) значение $\gamma = 8$ и используя известные формулы для производных эллиптических интегралов по параметру e ,

$$\frac{dK}{de} = \frac{E - (1 - e)K}{2e(1 - e)}, \quad \frac{dE}{de} = \frac{E - K}{2e}, \quad (31)$$

мы находим выражения для термодинамических функций

$$T = \frac{1}{K}, \quad \sigma = 4e(1 - e) \frac{dK}{de} = 2[E - (1 - e)K]. \quad (32)$$

Уравнение состояния $p = p(e)$ имеет вид

$$p = 2 \left(\frac{E(e)}{K(e)} - 1 \right) + e. \quad (33)$$

Квадрат скорости звука

$$c^2 = -4e(1 - e) \left(\frac{1}{K} \frac{dK}{de} \right)^2 \quad (34)$$

отрицателен в области $0 \leq e < 1$ существования периодических решений, то есть модуляционная система Уизема отвечает модуляционной неустойчивости периодической волны. Соответственно римановы инварианты (12) являются комплексными:

$$r_{\pm} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + v}{1 - v} \pm i \arcsin \sqrt{e}. \quad (35)$$

Тем не менее, подобно теории НУШ, эволюция плавных распределений модуляционных параметров подчиняется гидродинамическим уравнениям (24), (26), решение которых может быть получено преобразованием годографа.

4. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГОДОГРАФА

Для проведения преобразования годографа вводим вместо скорости v «быстроту» y согласно уравнениям

$$u^0 = \operatorname{ch} y, \quad u^1 = \operatorname{sh} y, \quad v = \operatorname{th} y, \quad (36)$$

а также переходим к переменным светового конуса

$$x_- = t - x, \quad x_+ = t + x. \quad (37)$$

Тогда уравнение (24) приобретает вид

$$\frac{\partial}{\partial x_-} \left(\frac{e^{-y}}{K(e)} \right) - \frac{\partial}{\partial x_+} \left(\frac{e^y}{K(e)} \right) = 0, \quad (38)$$

и оно удовлетворяется, если

$$\frac{e^{-y}}{K(e)} = \frac{\partial \phi}{\partial x_-}, \quad \frac{e^y}{K(e)} = \frac{\partial \phi}{\partial x_+} \quad (39)$$

для некого потенциала $\phi = \phi(x_-, x_+)$. Теперь, следуя Халатникову [31], мы делаем преобразование Лежандра, переходя к потенциалу $\mathcal{W} = \mathcal{W}(e, y)$,

$$\mathcal{W} = \phi - K^{-1} e^y x_- - K^{-1} e^{-y} x_+, \quad (40)$$

так что

$$\begin{aligned} d\mathcal{W} &= - \frac{dK^{-1}}{de} (e^y x_- + e^{-y} x_+) de - \\ &- \frac{1}{K} (e^y x_- - e^{-y} x_+) dy, \end{aligned} \quad (41)$$

откуда

$$\begin{aligned} x_- &= - \frac{e^{-y}}{2} \left(\frac{1}{dK^{-1}/de} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial e} + K \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial y} \right), \\ x_+ &= - \frac{e^y}{2} \left(\frac{1}{dK^{-1}/de} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial e} - K \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (42)$$

Эти формулы осуществляют преобразование годографа: если функция $\mathcal{W} = \mathcal{W}(e, y)$ известна, то они дают в неявном виде зависимость e и y от переменных (37) и тем самым от x и t .

Уравнение (26) после замен (36), (37) переходит в

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sigma e^{-y})}{\partial x_-} + \frac{\partial(\sigma e^y)}{\partial x_+} &= \\ &= \frac{\partial(\sigma e^{-y}, x_+)}{\partial(x_-, x_+)} + \frac{\partial(x_-, \sigma e^y)}{\partial(x_-, x_+)} = 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Умножая его на якобиан $\partial(x_-, x_+)/\partial(e, y)$, получаем после простых преобразований с учетом формул (32) и $d\sigma/de = 1/T = K(e)$ уравнение для $\mathcal{W}$:

$$\frac{\partial}{\partial e} \left[e(1 - e) K^2 \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial e} \right] + \frac{K^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{W}}{\partial y^2} = 0 \quad (44)$$

или

$$e(1-e)\frac{\partial^2 \mathcal{W}}{\partial e^2} + \left(\frac{E(e)}{K(e)} - e\right)\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial e} + \frac{1}{4}\frac{\partial^2 \mathcal{W}}{\partial y^2} = 0. \quad (45)$$

Это уравнение является эллиптическим и оно заменяет уравнение Эйлера-Пуассона, возникающее в приложении метода годографа к уравнениям газовой динамики (см., например, [34]). В модуляционно неустойчивой бездисперсионной динамике теории НУШ, описываемой уравнениями опрокинутой мелкой воды, аналогом уравнения (45) оказывается двумерное уравнение Лапласа, записанное в полярных координатах (см., например, [11–13]). Уравнение (44) переходит в это уравнение Лапласа в пределе малых e .

Важный класс решений уравнения (45) получается после разделения переменных

$$\mathcal{W}(e) = Z(e)Y(y), \quad (46)$$

так что

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} = \lambda^2 Y, \quad Y(y) = e^{\pm \lambda y}, \quad (47)$$

и $Z = Z(e)$ удовлетворяет уравнению

$$e(1-e)\frac{d^2 Z}{de^2} + \left(\frac{E(e)}{K(e)} - e\right)\frac{dZ}{de} + \frac{\lambda^2}{4}Z = 0. \quad (48)$$

С помощью формул (31) можно проверить, что при $\lambda^2 = 1$ его решением является функция $Z = 1/K(e)$. Поэтому делаем в (48) подстановку

$$Z = \frac{F(e)}{K(e)} \quad (49)$$

и получаем для $F(e)$ гипергеометрическое уравнение

$$e(1-e)\frac{d^2 F}{de^2} + (1-2e)\frac{dF}{de} + \frac{\lambda^2 - 1}{4}F = 0, \quad (50)$$

решением которого является гипергеометрическая функция $F = F((1+\lambda)/2, (1-\lambda)/2, 1; e)$ (см., например, [36, 37]). Подстановкой $e = (1-z)/2$ оно преобразуется к уравнению Лежандра

$$(1-z^2)\frac{d^2 F}{dz^2} - 2z\frac{dF}{dz} + n(n+1)F = 0, \quad n = \frac{\lambda-1}{2}, \quad (51)$$

которое при $n = 0, 1, 2, \dots$ имеет решения в виде многочленов Лежандра $P_n(z) = P_n(1-2e)$ и функций Лежандра 2-го рода $Q_n(z) = Q_n(1-2e)$. Ясно, что любая линейная комбинация решений (46) также является решением уравнения (45).

Проиллюстрируем развитую теорию примером.

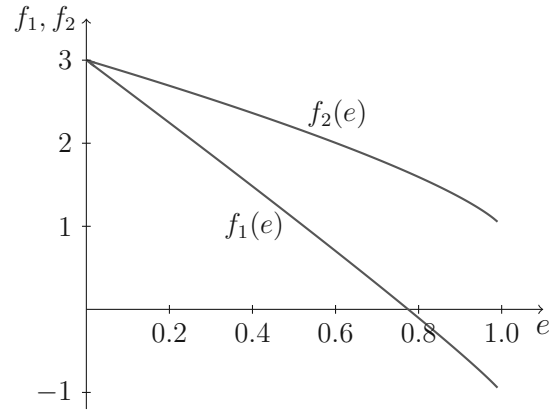


Рис. 1. Графики функций $f_1(e)$ и $f_2(e)$, определенных формулами (54)

5. ПРИМЕР: САМОСЖАТИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

Возьмем в качестве примера, иллюстрирующего поведение нелинейных модулированных волн в модели синус-Гордона, решение с $F = P_1(z) = 1 - 2e$, то есть с $n = 1$ и, значит, $\lambda = 3$:

$$\mathcal{W}(e, y) = \frac{1-2e}{K(e)} e^{3y}. \quad (52)$$

Его подстановка в формулы (42) дает соотношения

$$\begin{aligned} x_- = t - x &= -2f_1(e)e^{2y}, \\ x_+ = t + x &= -f_2(e)e^{4y}, \end{aligned} \quad (53)$$

где

$$\begin{aligned} f_1(e) &= \frac{(1-2e)E(e) - (1-e)(1-3e)K(e)}{E(e) - (1-e)K(e)}, \\ f_2(e) &= -\frac{(1-2e)E(e) - (1-e)K(e)}{E(e) - (1-e)K(e)}. \end{aligned} \quad (54)$$

Графики этих функций показаны на рис. 1. Их значения при $e = 0$ и $e = 1$ равны

$$\begin{aligned} f_1(0) &= f_2(0) = 3, \\ f_1(1) &= -1, \quad f_2(1) = 1, \end{aligned} \quad (55)$$

а разложения вблизи $e = 0$ имеют вид ($0 < e \ll 1$)

$$\begin{aligned} f_1(e) &= 3 - \frac{15}{4}e - \frac{3}{32}e^2 + \dots, \\ f_2(e) &= 3 - \frac{3}{2}e - \frac{3}{16}e^2 + \dots \end{aligned} \quad (56)$$

Формулы (53) задают в неявном виде зависимость переменных e и y от x и t . Удобно выразить

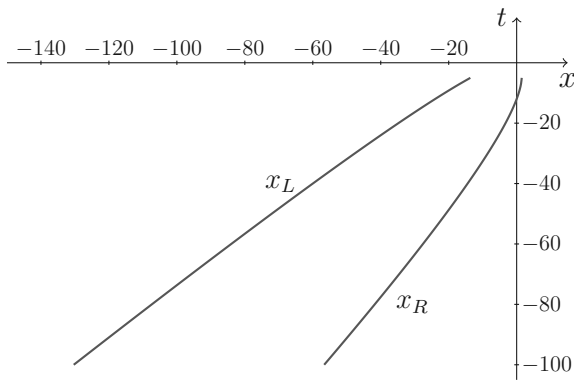


Рис. 2. Траектории левого x_L и правого x_R краев нелинейного волнового пакета на плоскости (x, t) согласно формулам (63) и (61), соответственно.

все функции при фиксированном значении времени t параметрически, где в качестве параметра выступает переменная e . В самом деле, из (53) находим

$$2t = -2f_1 e^{2y} - f_2 e^{4y}, \quad 2x = 2f_1 e^{2y} - f_2 e^{4y}, \quad (57)$$

так что первое уравнение дает

$$e^{2y} \equiv \frac{1+v}{1-v} = \sqrt{\left(\frac{f_1}{f_2}\right)^2 - \frac{2t}{f_2} - \frac{f_1}{f_2}}, \quad (58)$$

где мы выбрали положительный корень ввиду положительности функции e^{2y} . Подстановка e^{2y} во вторую формулу (57) дает

$$x = x(e) = t + 2f_1 \left(\sqrt{\left(\frac{f_1}{f_2}\right)^2 - \frac{2t}{f_2} - \frac{f_1}{f_2}} \right). \quad (59)$$

Эта формула определяет зависимость e от x в фиксированный момент времени t . Зависимость скорости v от e находим из (58):

$$v = v(e) = \frac{\sqrt{f_1^2 - 2f_2 t} - f_1 - f_2}{\sqrt{f_1^2 - 2f_2 t} - f_1 + f_2}. \quad (60)$$

Эта формула вместе с (59) определяет распределение v по x в параметрическом виде. Полученные формулы дают частное решение уравнений Уизема об эволюции нелинейного волнового пакета. Обсудим его основные свойства.

Прежде всего из положительности f_2 и ограниченности функций f_1, f_2 , очевидной из рис. 1, мы заключаем, что должно быть $t < 0$, то есть пакет был сформирован при достаточно больших по абсолютной величине отрицательных значениях t и затем он

эволюционирует с уменьшением $|t|$. Положив в (59) $e = 0$, находим с помощью (55) закон движения малоамплитудного края пакета:

$$x_R(t) = t + 6 \left(\sqrt{1 - 2t/3} - 1 \right). \quad (61)$$

Скорость этого края равна

$$\frac{dx_R}{dt} = 1 - \frac{2}{\sqrt{1 - 2t/3}}, \quad (62)$$

и она как раз совпадает с групповой скоростью (60) при $e = 0$: $dx_R/dt = v(e = 0)$.

Закон движения противоположного левого края пакета с $e = 1$ находим из (59), положив в этой формуле соответствующие значения (55):

$$x_L(t) = t - 2\sqrt{1 - 2t} - 2, \quad (63)$$

так что его скорость равна

$$\frac{dx_L}{dt} = 1 + \frac{2}{\sqrt{1 - 2t}}. \quad (64)$$

Для групповой скорости (60) находим на этом крае значение

$$v(1) = \frac{\sqrt{1 - 2t}}{\sqrt{1 - 2t} + 2}, \quad (65)$$

то есть ввиду соотношения (6) скорость этого края (64) равна фазовой скорости волны в этой точке: $dx_L/dt = V = 1/v(1)$. Это соответствует тому, что на крае с $e \rightarrow 1$ имеется последовательность кинков (29), в которые вырождается в этом пределе периодическая волна (28): скорость кинка, очевидно, равна $V = 1/v$. Траектории краев нелинейного волнового пакета показаны на рис. 2, из которого видно, что пакет сжимается с течением времени.

Подстановка формул для $x = x(e)$ и $v = v(e)$ из (59), (60) в периодическое решение (28) дает нам вместе с (59) в параметрической форме профиль промодулированной волны в момент времени t (где мы пренебрегли, естественно, дополнительным медленным сдвигом фазы вдоль волновой структуры; см., например, [38]), и огибающие этого профиля, не зависящие от сдвига фазы, определяются, очевидно, формулой

$$a = \pm 2 \arcsin \sqrt{e(x)}. \quad (66)$$

Типичный такой профиль изображен на рис. 3 сплошной линией, а его огибающие (66) — штриховыми линиями.

Длина волны (4) для случая уравнения синус-Гордон выражается формулой

$$L = 4 \frac{\sqrt{1 - v^2(e)}}{v(e)} K(e). \quad (67)$$

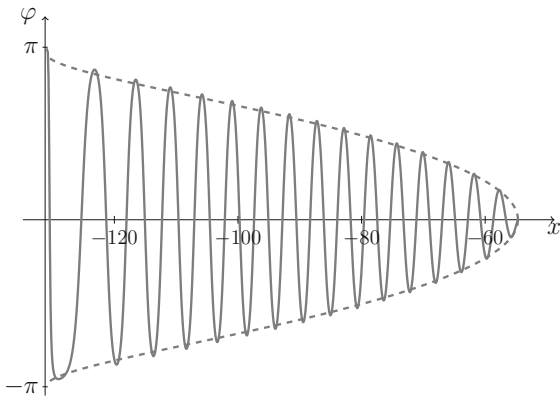


Рис. 3. Профиль волны в промодулированном нелинейном импульсе $\varphi(x, t)$ при $t = -100$

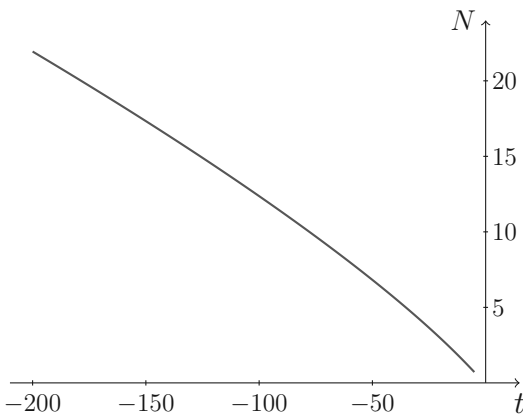


Рис. 4. Число колебаний в нелинейном волновом пакете в зависимости от времени

Естественно, для применимости модуляционной теории Уизема необходимо, чтобы длина волны L была много меньше, чем длина всей волновой структуры. С практической точки зрения можно заметить, что L стремится к бесконечности при $v \rightarrow 0$, а скорость правого края $dx_R/dt = v(0)$ (62) обращается в нуль при $t = -9/2$. Следовательно, наше частное решение уравнений Уизема применимо только при $t < 0$, $|t| \gg 5$.

Число нелинейных колебаний в структуре приближенно равно

$$N \cong \int_{x_L}^{x_R} \frac{dx}{L} = \int_0^1 \frac{|dx/de|}{L(e)} de, \quad (68)$$

и, как видно из рис. 4, оно убывает со временем, становясь порядка единицы при $t = -5$ на границе области применимости теории Уизема. Вывод об

уменьшении числа осцилляций в волновой структуре согласуется с тем, что в силу $v < 1$ фазовая скорость $V = 1/v(0)$ на правом крае всегда больше групповой скорости $v(0)$ правого края, так что с течением времени волны покидают узимовскую область нелинейных колебаний через ее малоамплитудный край. Стоит отметить, что ситуация здесь противоположна теории дисперсионных ударных волн в модуляционно устойчивых системах [39], в которых волны входят в узимовскую нелинейную область через малоамплитудный край [40], что дает возможность вычислить число солитонов, образующихся из начальной интенсивной простой волны при асимптотически больших временах [41] (см. также [42–46]).

Отметим, что согласно формулам (42) изменение знака функции W эквивалентно одновременному изменению знаков x и t . Следовательно, при изменении знака W мы получим решение, описывающее расширение нелинейного волнового пакета с ростом $t > 0$, аналогичное формированию волновой структуры при распаде ступеньки в теории НУШ (см., например, [21–23, 47]), однако в этом случае эволюция не является автомодельной и определение движения малоамплитудного края волновой структуры остается за пределами теории Уизема-Гуревича-Питаевского.

Эволюция нелинейных волновых пакетов, для описания которых в формуле (49) используются функции Лежандра второго рода, имеет качественно такой же характер, как и в случае многочленов Лежандра, и поэтому мы здесь не будем останавливаться на конкретных деталях.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как известно, методы газовой динамики могут быть с успехом применены для описания эволюции не только устойчивых, но также и неустойчивых систем (см., например, [14]). Создание модуляционной теории Уизема [17, 18], открытие метода обратной задачи рассеяния [48] и развитие общей теории систем гидродинамического типа [49] позволило распространить эти методы на обширную область теории дисперсионных ударных волн (см., например, обзоры [41, 50]). Хотя эти методы применимы и к модуляционно неустойчивым системам (см., например, работы [51–54] по теории уравнения синус-Гордон), тем не менее практические приложения модуляционной теории к однофазным волнам в неустойчивых системах пока ограничивались лишь частными

случаями типа «эволюции ступеньки» [21–23] (см. также [47] и приведенные там ссылки). Развитие области неустойчивости в неоднородных системах обсуждалось в работе [25] также только для малоамплитудного края и не затрагивало вопроса об эволюции параметров во всей области нелинейных осцилляций. В настоящей работе дано точное решение модуляционных уравнений Уизема для модуляционно неустойчивой нелинейной волны в модели синус-Гордона. Развитая теория показывает весьма нетривиальную эволюцию нелинейного волнового пакета, которая заключается в его сжатии, сопровождаемом уходом волн из области нелинейных осцилляций, так что за конечное время в этой области остается лишь малое число порядка единицы нелинейных колебаний. На этой стадии теория Уизема теряет свою применимость и вопрос о дальнейшей эволюции волнового импульса должен рассматриваться другими методами.

Можно предполагать, что предложенный здесь подход окажется эффективным и при обсуждении модуляционно неустойчивых для других вариантов нелинейного уравнения Клейна–Гордона, в частности для уравнения, описывающего возбуждение волн ветром (см. [55]) или уравнений, описывающих распространение электромагнитных волн в нелинейных средах (см., например, [56–58]).

Благодарности. Автор выражает благодарность С. Ю. Доброхотову, Е. А. Кузнецову и С. В. Сазонову за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант N 19-72-30028).

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. А. Аскарьян, ЖЭТФ **42**, 1568 (1962).
2. Г. А. Аскарьян, УФН **111**, 249 (1973).
3. R. Y. Chiao, E. Garmire, and C. H. Townes, Phys. Rev. Lett. **13**, 479 (1964).
4. А. А. Веденов, Л. И. Рудаков, ДАН СССР **159**, 767 (1964).
5. В. Е. Захаров, ЖЭТФ, **62**, 1745 (1972).
6. Л. А. Островский, ЖЭТФ **51**, 1189 (1966).
7. T. B. Benjamin and J. E. Feir, J. Fluid Mech. **27**, 41 (1967).
8. В. Е. Захаров, ЖПМТФ, **9**, 86 (1968).
9. В. И. Таланов, Письма в ЖЭТФ **2**, 218 (1965).
10. С. А. Ахманов, А. П. Сухоруков, Р. В. Хохлов, ЖЭТФ **50**, 1537 (1966).
11. M. J. Lighthill, J. Inst. Math. Appl. **1**, 269 (1965).
12. W. D. Hayes, Proc. Roy. Soc. Lond. A **332**, 199 (1973).
13. А. В. Гуревич, А. С. Шварцбург, ЖЭТФ **58**, 2012 (1970).
14. С. К. Жданов, Б. А. Трубников, *Квазигазовые неустойчивые среды*, Наука, Москва (1991).
15. В. И. Карпман, Письма ЖЭТФ **6**, 829 (1967).
16. В. И. Карпман, Е. М. Крушкаль, ЖЭТФ **55**, 530 (1968).
17. G. B. Whitham, Proc. Roy. Soc. Lond. A, **283**, 238 (1965).
18. Дж. Уизем, *Линейные и нелинейные волны*, Мир, Москва (1974).
19. M. G. Forest and J. E. Lee, in: *Oscillation Theory, Computation, and Methods of Compensated Compactness*, ed. by C. Dafermos et al., IMA Volumes on Mathematics and its Applications, Vol. 2, (Springer, New York (1986).
20. М. В. Павлов, ТМФ **71**, 351 (1987).
21. А. М. Kamchatnov, Phys. Lett. A **162**, 389 (1992).
22. G. A. El, A. V. Gurevich, V. V. Khodorovskii, and A. L. Krylov, Phys. Lett. A **177**, 357 (1993).
23. Р. Ф. Бикбаев, В. Р. Кудашев, Письма в ЖЭТФ **59**, 741 (1994).
24. G. Biondini and D. Mantzavinos, Phys. Rev. Lett. **116**, 043902 (2016).
25. А. М. Kamchatnov and D. V. Shaykin, EPL **136**, 40001 (2021).
26. Э. Скотт, *Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур*, Физматлит, Москва (2007).
27. In: *The sine-Gordon Model and its Applications*, ed. by J. Cuevas-Maraver, P. G. Kevrekidis, F. Williams, Cham, Springer (2014).
28. В. П. Маслов, ТМФ **1**, 378 (1969).
29. С. Ю. Доброхотов, В. П. Маслов, Итоги науки и техн. Сер. Соврем. пробл. мат. **15**, 3 (1980).

30. Л. Д. Ландау, Изв. АН СССР, серия физ. **17**, 51 (1953).
31. И. М. Халатников, ЖЭТФ **27**, 529 (1954).
32. В. Г. Носов, А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **70**, 768 (1976).
33. А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **156**, 689 (2019).
34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
35. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, часть 1*, Физматлит, Москва (2001).
36. М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1979).
37. Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон, *Курс современного анализа*, т. II, Физматлит, Москва (1963).
38. С. Ю. Доброхотов, Д. С. Миненков, ТМФ **166**, 350 (2011).
39. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **65**, 590 (1973).
40. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **93**, 871 (1987).
41. А. М. Камчатнов, УФН **191**, 52 (2021).
42. G. A. El, A. Gammal, E. G. Khamis, R. A. Kraenkel, and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. A **76**, 053813 (2007).
43. G. A. El, R. H. J. Grimshaw, and N. F. Smyth, Physica D **237**, 2423 (2008).
44. A. M. Kamchatnov, Chaos **30**, 123148 (2020).
45. А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **151**, 76 (2021).
46. L. F. Calazans de Brito, A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. E **104**, 054203 (2021).
47. А. М. Камчатнов, Phys. Rep. **286**, 199, (1997).
48. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов. Метод обратной задачи*, Физматлит, Москва (1980).
49. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, УМН **44**, 29 (1989).
50. G. A. El, M. A. Hoefer, Physica D **333**, 11 (2016).
51. M. J. Ablowitz, D. J. Kaup, A. S. Newell, and H. Segur, Phys. Rev. Lett. **30**, 1262 (1973).
52. Л. А. Тахтаджян, ЖЭТФ **66**, 476 (1974).
53. В. А. Козел, В. П. Котляров, ДАН УССР, сер. А **10**, 878 (1976).
54. P. G. Grinevich and S. P. Novikov, Comm. Pure Appl. Math. **56**, 956 (2003).
55. Е. А. Кузнецов, П. М. Лушников, ЖЭТФ **108**, 614 (1995).
56. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, Письма ЖЭТФ **83**, 873 (2006).
57. С. В. Сазонов, ЖЭТФ **146**, 483 (2014).
58. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Rev. A **98**, 063803 (2018).

ОБРАЗОВАНИЕ И РАСПАД АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ — ОСНОВНОЙ МЕХАНИЗМ НЕУПРУГИХ ПОТЕРЬ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ АТОМОВ кэВ-ЭНЕРГИЙ

А. Н. Зинovieв^{}, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин*

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

Поступила в редакцию 31 октября 2022 г.,

после переработки 20 декабря 2022 г.

Принята к публикации 20 декабря 2022 г.

Показано, что образование автоионизационных состояний вносит доминирующий вклад в формирование неупругих потерь энергии и ионизацию при столкновениях атомов в области кэВ-энергий, т. е. при скоростях, меньших скоростей атомных электронов. Предложены скейлинги для расчета сечений образования К- и L-вакансий во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов. Предложена модель, устанавливающая связь процессов ионизации и величины наблюдаемой неупругой потери энергии. Представлены результаты исследований оже-переходов в квазимолекуле — короткоживущей системе, образующейся при сближении двух атомных частиц. Выяснена природа непрерывной составляющей в спектрах электронов, эмитируемых при соударениях. Показано, что возбуждение автоионизационных состояний определяет сечения торможения атомов кэВ-энергий в веществе.

EDN: BFPFEU

DOI: 10.31857/S0044451023050139

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	744	3.2. Скейлинги для расчета сечений образования К-вакансий	752
2. Образование вакансий в L-оболочках сталкивающихся атомов	745	4. Возбуждение M-оболочек	754
2.1. Скейлинги для сечений образования L-вакансий	745	5. Оже-переходы в квазимолекуле	755
2.2. Эмиссия характеристического излучения и оже-электронов при распаде L-вакансий	748	6. Разделение вкладов оже-ионизации и динамической ионизации в эмиссию электронов	760
2.3. Взаимосвязь ионизации частиц и неупругих потерь энергии при соударениях атомов средних масс	749	7. Вклад образования автоионизационных состояний в тормозные потери ...	762
3. Образование К-вакансий	751	8. Заключение	763
3.1. Исследования образования и распада К-вакансий	751	Литература	764

1. ВВЕДЕНИЕ

Предлагаемая статья охватывает более чем полувековой период экспериментального и теоретическо-

го изучения формирования неупругих потерь энергии при столкновениях атомов кэВ-энергий, т. е. при сравнительно низких скоростях относительного движения частиц, меньших скоростей атомных электронов. Установлено, что картина и величины сече-

^{*} E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

ний неупругих процессов определяются свойствами квазимолекулы, которая образуется при сближении двух атомных частиц и распадается при их разлете. Создание количественной модели квазимолекулы явилось важной задачей физики атомных столкновений, а также нашло применение в физике плазмы и для развития методов анализа вещества.

Развитие представлений о прохождении частиц в веществе является предметом неослабевающего интереса в связи с возрастающим числом приложений (использование ионных пучков для создания новых материалов и их диагностики, решение проблем первой стенки в токамаке-реакторе, в астрофизике). Безусловно, среди специалистов, работающих в области взаимодействия ионов кэВ-энергий с твердым телом, есть общее понимание, что в основе взаимодействия налетающего иона с ансамблем атомов твердого тела лежат последовательные парные столкновения иона с атомами мишени. Тем не менее, продолжают использоваться подходы, игнорирующие достижения физики атомных столкновений в газовой фазе.

Одной из задач обзора стало обобщение накопленных экспериментальных данных. К числу недавних достижений можно отнести разработанные авторами скейлинги для расчета сечений образования вакансий во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов (разд. 2–4). Предложена модель, устанавливающая связь процессов ионизации с величиной неупругой потери энергии (разд. 2.3). Эти данные актуальны как для развития методов анализа состава вещества с использованием пучков ионов или атомов, так и для развития представлений о торможении частиц в веществе.

В обзоре показано, что возбуждение автоионизационных состояний в квазимолекуле должно обязательно учитываться при расчете торможения частиц кэВ-энергий в веществе. Установлен вклад этого механизма в тормозные способности, а также предсказана пороговая зависимость сечения тормозных потерь от энергии бомбардирующих ионов, что не может объяснить ни одна из существующих теоретических моделей (разд. 7).

Установлена важная роль механизма выдвигания электронов наружных оболочек в формировании неупругих потерь (по аналогии с выдвиганием электронов внутренних оболочек), что долгое время оставалось непонятым. В итоге формируются высоковозбужденные автоионизационные состояния из слабосвязанных электронов. Эти состояния могут распадаться как путем автоионизации, так и путем переходов электрона в континуум вследствие дина-

мики соударения (в нашем обзоре мы будем называть этот процесс динамической ионизацией).

Следует отметить, что динамическая ионизация связана с проявлением принципа неопределенности Гейзенберга, который говорит, что в случае зависимости энергии квазимолекулярного терма от межъядерного расстояния электрон может иметь любую энергию и в том числе оказаться в континууме. В этом отличие динамической ионизации от прямой ионизации, обусловленной кулоновским взаимодействием налетающей частицы на электронную подсистему. В разд. 5 обсуждаются оже-переходы в квазимолекуле. Показана применимость существующих квантово-механических моделей описания этого явления, учитывающих проявление динамики соударения. В разд. 6 мы приводим результаты экспериментального исследования проявления динамической ионизации и сопоставления вкладов автоионизации и динамической ионизации. Достигнуто количественное описание спектров электронов и сечений ионизации. Выяснена природа непрерывной составляющей в спектрах электронов, эмитируемых при соударениях.

Квазимолекулярная модель получила много убедительных подтверждений в последующих экспериментальных исследованиях, а также дальнейшее развитие в теоретических работах. К сожалению, из многочисленных публикаций периода становления квазимолекулярной модели (см. обзоры [1–4]) не сделан обобщающий вывод, вынесенный в заголовки данной статьи, о механизме неупругих потерь. Как правило, исследования сосредоточены на анализе какого-то одного из проявлений возбуждения автоионизационных состояний, например, формирования зарядовых состояний сталкивающихся частиц, выхода рентгеновского излучения или эмиссии электронов. В данной работе представлен вывод о возбуждении и распаде автоионизационных состояний как основном механизме неупругих потерь при столкновении атомов в кэВ-диапазоне энергий.

2. ОБРАЗОВАНИЕ ВАКАНСИЙ В L-ОБОЛОЧКАХ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ АТОМОВ

2.1. Скейлинги для сечений образования L-вакансий

Явления во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов — объект интенсивных исследований, начиная с зарождения физики атомных столкновений. Первым (на рубеже 60-х годов про-

шлого столетия) было достигнуто понимание механизмов ионизации внутренних оболочек бесструктурными частицами: протонами и альфа-частицами. Ионизация в этом случае обусловлена прямым кулоновским взаимодействием налетающей частицы с электроном атома. На рубеже 70-х годов исследования неупругих процессов получили существенный импульс для своего развития и сформировались в одно из наиболее значимых направлений в физике атомных столкновений. Основная причина — обнаружение в экспериментальных работах [5–10] необычно больших сечений ионизации уже при кэВ-энергиях соударения по сравнению с ионизацией фотонами, электронами или протонами. Основопологающий шаг в понимании обнаруженного явления был сделан в работе [11], где к таким столкновениям применили приближение квазимолекулы — короткоживущей системы из двух сталкивающихся атомов, энергетические уровни которой меняются при изменении межъядерного расстояния. Фано и Лихтен [11] предложили использовать приближение молекулярных орбиталей (МО), согласно которому электроны рассматриваются как независимые частицы, движущиеся в экранированном поле ядер (см. рис. 1).

В столкновениях атомов средних масс (в качестве примера рассматривался случай Ar–Ar) при сближении частиц до межъядерных расстояний, сравнимых с радиусами L-оболочек, молекулярная орбиталь $4f\sigma$, формирующаяся из $2p$ -уровней сталкивающихся атомов Ar, резко выдвигается и пересекает несколько верхних вакантных уровней. При переходах электронов с рассматриваемой орбитали на свободные уровни при разлете частиц может образоваться одна или две вакансии во внутренней L-оболочке и возникает автоионизационное состояние. Большие сечения неупругих потерь были объяснены образованием внутренних вакансий вследствие электронных переходов при пересечении или сближении уровней квазимолекулы и их последующим распадом вследствие оже- или радиационных переходов. В итоге, неупругие потери энергии в отдельном акте соударения складываются из затрат кинетической энергии столкновения на ионизацию атомов-партнеров и энергию эмитированных электронов или квантов.

Результаты работ [5–7] были подтверждены экспериментами [10–13]. В частности, в соответствии с предсказанием модели Фано–Лихтена, что при столкновениях разных партнеров $4f\sigma$ -орбиталь формируется из $2p$ -оболочки партнера соударения с меньшим атомным номером, эксперимент под-

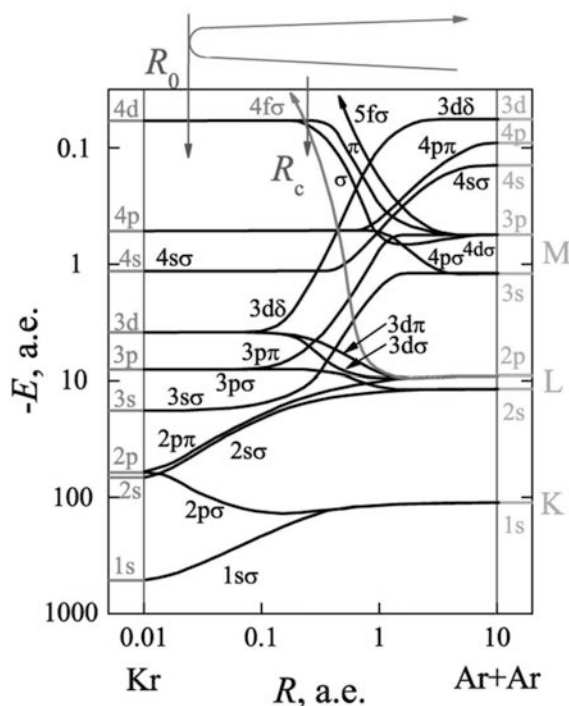


Рис. 1. Корреляционная диаграмма для системы Ar–Ar [11]. Стрелка демонстрирует изменение межъядерного расстояния при сближении и разлете частиц

твердил, что вакансии образуются в партнере с меньшим атомным номером.

В последующих работах [14] было существенно повышено энергетическое разрешение при измерении спектров потерь энергии путем применения методики совпадений, когда напрямую измерялись энергии обоих атомов — партнеров столкновения. Это позволило определить природную ширину линий, которая оказалась 65 ± 15 эВ для случая Ar–Ar [14]. Было показано, что оже-распад вакансии приводит к ионизации частиц, при этом в среднем удаляется 1.4 ± 0.2 электрона при заполнении одной вакансии.

Экспериментально установленные [5–7, 10, 13, 14] закономерности образования L-вакансий натолкнули на мысль о возможности определения сечений ионизации L-оболочки для различных комбинаций партнеров столкновения расчетным путем. Для этого рассмотрим более подробно вероятность образования L-вакансий вследствие выдвижения $4f\sigma$ -орбитали. Было показано, что вероятности образования одной $W_1(R_0)$ и двух $W_2(R_0)$ вакансий зависят в основном от расстояния наибольшего сближения частиц R_0 и слабо зависят от скорости соударения. Введем вспомогательную функцию

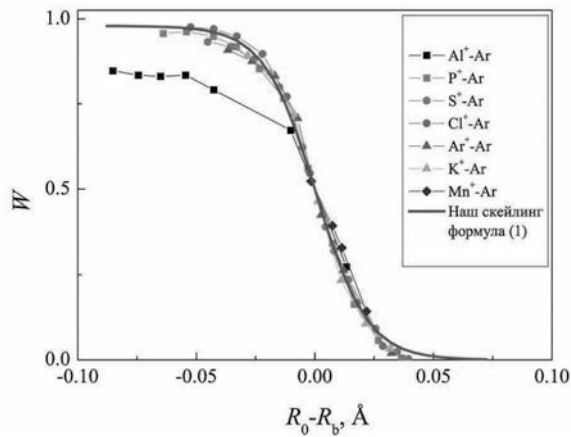


Рис. 2. Зависимость вероятности образования $L_{2,3}$ -вакансии от достигнутого расстояния наибольшего сближения R_0 [15, 16]

$W(R_0) = W_2(R_0) + 0.5W_1(R_0)$. На рис. 2 представлена зависимость вероятности образования вакансии для большого числа исследованных случаев от достигнутого расстояния наибольшего сближения R_0 .

Как известно, частицы проходят область квазипересечения молекулярных уровней дважды, при сближении и разлете частиц. Если вероятность перехода P , то вероятность перехода при двукратном прохождении $W = 2P(1 - P)$. При любых значениях P значение W не превышает 0.5, что противоречит эксперименту, где наблюдается $W = 0.95$. Данное противоречие было объяснено в работе [17] возможностью перемешивания высоковозбужденных состояний при движении частиц от расстояния R_c до точки поворота R_0 и обратно.

Установленная нами для большого числа случаев зависимость вероятности образования вакансии от достигнутого расстояния наибольшего сближения R_0 позволила предложить процедуру определения сечения ионизации L-оболочки для различных неизученных комбинаций партнеров столкновения с помощью масштабирования [16].

Вероятность образования L-вакансии на межъядерном расстоянии R_0 может быть описана в этом случае выражением

$$W(R_0) = \frac{1}{\beta + \exp\left[\gamma\left(\frac{R_0}{R_b} - 1\right)\right]}, \quad (1)$$

где $\beta = 1.02$, $\gamma = 22.8$, а параметр R_b определяется из условия $W(R_b) = 0.5$ и близок к межъядерному расстоянию R_c , на котором $4f\sigma$ -орбиталь пересекает незаполненные верхние уровни.

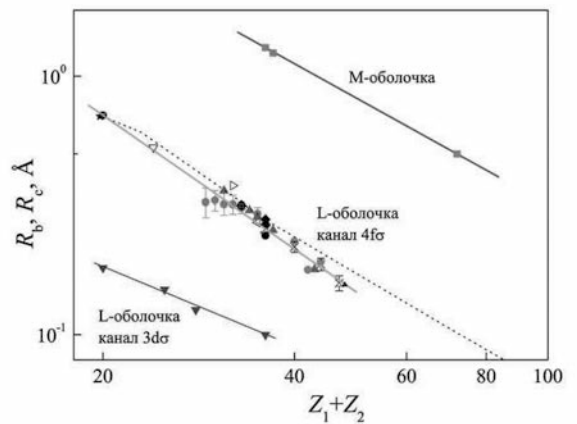


Рис. 3. Зависимость параметров R_b (пустые символы) и R_c (закрашенные символы) от суммы зарядов ядер сталкивающихся частиц $Z_1 + Z_2$ при возбуждении L- и M-оболочек. Штрихи — результаты расчетов положения точки пересечения молекулярных орбиталей для различных систем [18–20]

На рис. 3. приведена зависимость параметров R_c и R_b для различных комбинаций сталкивающихся частиц. Эта зависимость для R_c была получена в [15] путем обработки существующих экспериментальных данных о порогах возбуждения $L_{2,3}$ -оболочки при столкновениях атомных частиц как в газовой, так и в твердой фазах. Полученная зависимость хорошо согласуется с расчетами положения точки пересечения молекулярных орбиталей для различных систем [18–20] и применима при $Z_1 + Z_2 \geq 20$. Зависимость для канала $3d\sigma$ получена в настоящей работе (см. ниже).

Сечение ионизации, связанное с возбуждением $L_{2,3}$ -оболочки, может быть получено следующим образом: сначала определяется параметр R_b по данным, показанным на рис. 3, а затем сечение ионизации рассчитывается путем интегрирования $W[R_0(b)]$ по всем параметрам удара:

$$\sigma(E_0) = 2\pi N \int_0^\infty W[R_0(b)] b db, \quad (2)$$

где N — число вакансий, образующихся при малых R_0 . Связь параметра удара b и расстояния наибольшего сближения R_0 определяется из уравнения $b = R_0(1 - U(R_0)/E_{cms})^{1/2}$, где $E_{cms} = M_2/(M_1 + M_2)E_0$ — энергия соударения в системе центра масс, M_1 и M_2 — массы сталкивающихся частиц. Зависимость R_0 от b может быть рассчитана с использованием потенциала

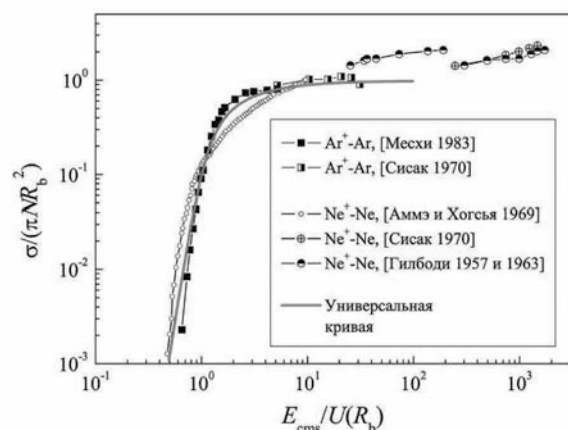


Рис. 4. Универсальная кривая для сечения возбуждения $L_{2,3}$ -оболочки [16]. Точки — экспериментальные данные из работ [23–27]

взаимодействия, например, [21, 22]. Полученная зависимость приведена на рис. 4 в универсальных координатах — сечение нормировано на πNR_b^2 , а энергия соударения в системе центра масс отнесена к значению потенциала при $R = R_c$.

Как видно на рис. 4, универсальная кривая хорошо описывает как случай образования $L_{2,3}$ -вакансий при столкновениях Ar–Ar [23, 24], так и случай ионизации наружных L-оболочек в системе Ne–Ne [25–27]. С помощью предложенного скейлинга можно оценить сечение ионизации L-оболочки для неисследованных случаев.

При резко несимметричных столкновениях ионизация L-оболочки Ar вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей наблюдалась впервые в работе [28] при столкновениях N–Ar и Ne–Ar. Из полученных зависимостей вероятности образования вакансий от межъядерного расстояния можно определить характерные расстояния R_b для выдвигания $3d\sigma$ -орбитали для этих систем. Аналогичные оценки R_b можно получить также для случаев Ar–Ar, N–Ar, O–Ar, используя данные работ [3, 28–30]. Зависимость характерного расстояния для выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей от суммы зарядов партнеров соударения также приведена на рис. 3, что позволяет построить скейлинг для определения сечения ионизации, обусловленного этим каналом.

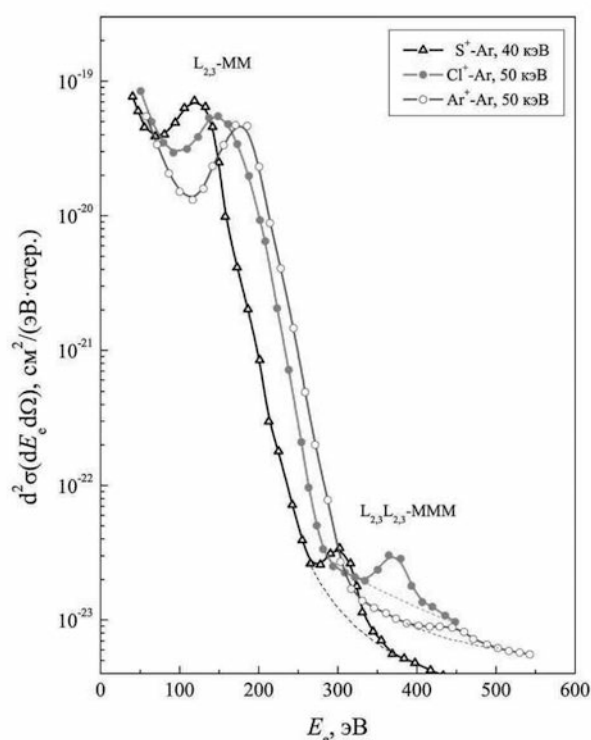


Рис. 5. Энергетические спектры электронов при столкновениях Cl^+ , Ar^+ –Ar при энергии 50 кэВ [33], S^+ –Ar при энергии 40 кэВ [35]

2.2. Эмиссия характеристического излучения и оже-электронов при распаде L-вакансий

Распад образующихся внутренних вакансий приводит к эмиссии оже-электронов [3, 24, 31–33] и характеристического излучения [34]. На рис. 5 приведены спектры электронов для систем S^+ , Cl^+ , Ar^+ –Ar.

В спектре электронов наблюдаются две основные компоненты: при низких энергиях электронов имеется вклад от распада автоионизационных состояний, связанных с возбуждением наружных оболочек, а при энергиях около 200 эВ наблюдается группа характеристических оже-электронов вследствие распада $2p$ -вакансий в Ar. Высокая чувствительность, достигнутая в наших экспериментах, позволила обнаружить оже-переходы нового типа — трехэлектронные оже-переходы (пики при 300–400 эВ на рис. 5), когда две вакансии заполняются с испусканием одного оже-электрона, уносящего всю энергию обоих переходов. Поскольку в случае Cl–Ar обе вакансии образуются в легком партнере соударения — Cl, вероятность трехэлектронного перехода оказывается выше, чем в случае столкновений Ar–

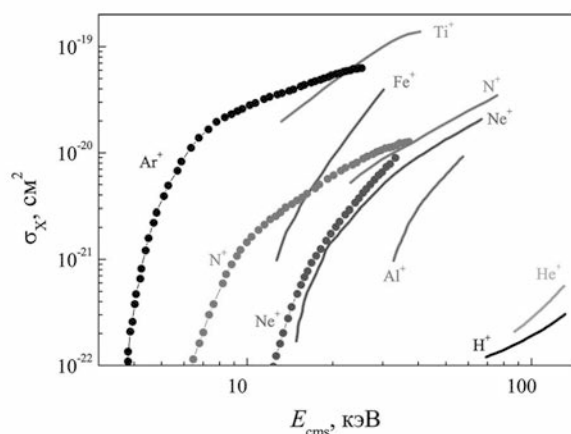


Рис. 6. Зависимость сечений эмиссии характеристического излучения при столкновении различных ионов с Ar. Линии с точками — наши данные. Сплошные линии — данные [34]

Ar, когда вакансии могут быть распределены между партнерами соударения. Обнаружение этого явления вызвало всплеск интереса к электронным корреляционным эффектам в атомной физике и развитие теоретических исследований. Подробное рассмотрение коррелированных переходов можно найти в [35–37].

На рис. 6 представлены зависимости сечений эмиссии характеристического излучения, измеренные в работах [34], и наши данные для систем N, Ne, Ar–Ar. Как видно на рис. 6, сечения эмиссии характеристического излучения в случае образования внутренних вакансий из-за выдвигания орбиталей на много порядков превышают такие же сечения при бомбардировке протонами и альфа-частицами. Измеренные сечения образования вакансий [14, 28] совпадают с сечениями эмиссии характеристического излучения оже-электронов и на несколько порядков превышают сечения эмиссии характеристического излучения, поскольку выход флюоресценции мал. В то же время пороги образования вакансий, эмиссии характеристических оже-электронов и излучения совпадают. Например, выход флюоресценции при заполнении $L_{2,3}$ -вакансии для случая Ar–Ar вблизи порога образования вакансий составляет $3 \cdot 10^{-4}$ и существенно увеличивается с ростом энергии соударения до $2 \cdot 10^{-3}$ при $E_0 = 50$ кэВ. Согласно [38], выход флюоресценции при заполнении $2p$ -вакансии зависит от заряда иона. Для нашего рассмотрения важно, что на пороге образования вакансии выход флюоресценции близок к значению для нейтрального атома, т. е. произошел переход электрона на вы-

соко расположенный квазимолекулярный уровень. При росте энергии соударения имеет место ионизация наружной оболочки и выход флюоресценции в рассматриваемом случае заметно возрастает.

2.3. Взаимосвязь ионизации частиц и неупругих потерь энергии при соударениях атомов средних масс

Более внимательного и детального обсуждения заслуживает взаимосвязь ионизации частиц при столкновениях и наблюдаемых неупругих потерь энергии. Величину неупругой потери энергии можно оценить из следующей модели: для образования очередного автоионизационного состояния требуется перевести в возбужденное состояние два электрона, для чего потребуется затрата энергии, равная сумме двух потенциалов возбуждения. Потенциал возбуждения $E_{ex.}(i)$ для ионов различной зарядности i легко оценить следующим образом:

$$E_{ex.}(i) = I_i - 13.6 \left(\frac{Z_{eff}}{n} \right)^2, \quad (3)$$

где I_i — потенциал ионизации атомной частицы с зарядом i , Z_{eff} — эффективный заряд остова атома, n — главное квантовое число возбужденного уровня. При возбуждении одного электрона мы полагали $Z_{eff} = 1$, при дальнейшем возбуждении Z_{eff} увеличивается на $0.65(N - 1)$, где N — число возбужденных электронов. Поправка на экранирование учитывается по правилу Слетера [39].

Как видно на рис. 7, предложенная модель успешно описывает наблюдаемые значения неупругих потерь энергии. Важно отметить, что вклад ионизационных потерь составляет 40–60% от полной потери энергии. Это связано с тем фактом, что для образования автоионизационного состояния нужно возбуждение двух электронов, т. е. затрата двух потенциалов возбуждения, а для переходов в высоковозбужденные состояния потенциал возбуждения близок к потенциалу ионизации. В предложенной модели не учтена возможность многоэлектронных оже-переходов, которые могут повлиять на рассматриваемое отношение. В частности, при распаде L-вакансий в системе $Ar^+ - Ar$ наблюдалось удаление 1.4 ± 0.2 электрона при заполнении одной вакансии, что связано с явлением встряски атома при заполнении L-вакансии [14].

Рассмотрим ионизацию частиц при соударениях $Ne^+ - Ne$. На рис. 8 а представлена зависимость числа удаленных электронов от достигнутого расстояния

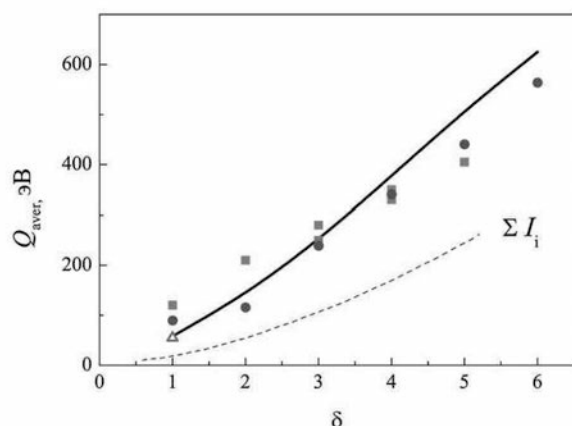


Рис. 7. Сравнение значений средней неупругой потери энергии в зависимости от числа удаленных электронов при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$. Кружки — данные работы [12], треугольник — [40], значения получены усреднением по наблюдаемым зарядовым состояниям. Квадратики — данные из работы [41] для конкретного процесса 10 m . Сплошная линия — предложенная модель. Штриховая кривая — вклад ионизационных потерь

наибольшего сближения. Рассматривается схема изменения зарядовых состояний частиц в результате столкновения: $\text{Ne}^+ + \text{Ne} = \text{Ne}^{m+} + \text{Ne}^{n+}$. При измерениях методом совпадений [12] фиксируются заряды обоих партнеров соударения m и n , и число удаленных электронов $\delta = m + n - 1$. В экспериментах [42, 43] фиксировался только заряд налетающей частицы, величина δ вычислялась как $\delta = 2m - 1$, т. е. предполагалось равенство $m = n$. При энергиях менее 25 кэВ на измерения m и n влияет процесс перезарядки. На рис. 8а для зависимостей из работы [43] эти колебания усреднены.

При $R = 0.7 \text{ \AA}$ наблюдается порог в энергетической зависимости сечения ионизации [25]. На рис. 8а сплошной черной линией приведена измеренная в работе [40] зависимость вероятности возбуждения автоионизационного состояния от R_0 . Видно, что величина δ возрастает вблизи порога на 1, а затем при уменьшении расстояния растет и при энергии 25 кэВ достигает 2. На наш взгляд это означает, что с ростом энергии соударения происходит срыв электрона в континуум и разрушение автоионизационного состояния. Как показали наши оценки [44], вероятность перехода двух электронов в континуум весьма высока. Порог при $R = 0.7 \text{ \AA}$ связан с выдвиганием $4f\sigma$ -орбитали (в случае $\text{Ne } 2p$ -оболочка является наружной). При $R = 0.2 \text{ \AA}$ наблюдается рост степени ионизации частиц вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и

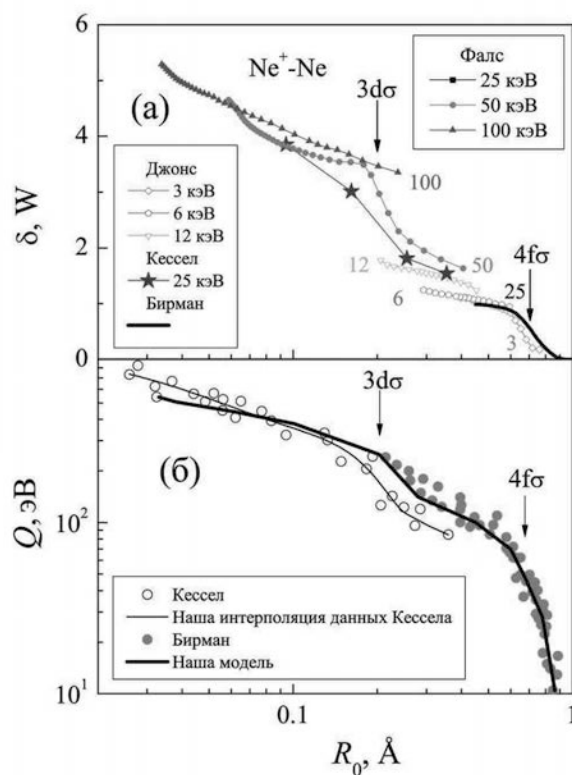


Рис. 8. Зависимость среднего числа удаленных электронов $\delta = m + n - 1$ (а) и неупругой потери энергии (б) от достигнутого расстояния наибольшего сближения при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$. Стрелками указаны пороги выдвигания $4f\sigma$ - и $3d\sigma$ -орбиталей. На рис. 8а цифры у кривых обозначают энергии соударения в кэВ; звездочки — измерения методом совпадений [12]; линии с заполненными и открытыми кружками — данные из работ [42, 43] соответственно; сплошная линия — зависимость вероятности образования автоионизационного состояния W от достигнутого межъядерного расстояния [40]. На рис. 8б открытые кружки — эксперимент [12], заполненные кружки — эксперимент [40].

Жирная сплошная линия — наша модель

$3d\pi$ -орбиталей, переходы с которых, обусловленные вращательной связью с $3d\delta$ -состоянием, могут приводить к возбуждению до 6 электронов, и величина δ в очередной раз возрастает.

На рис. 8б представлена сводка данных о неупругих потерях энергии для столкновений $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$, полученных различными авторами [12, 40]. Отмечены пороги образования автоионизационных состояний вследствие выдвигания $4f\sigma$ - и $3d\sigma$ -орбиталей соответственно. Согласно работе [40], величина неупругой потери вблизи порога составляет 55 эВ. Жирной сплошной линией показаны значения неупругой потери энергии, рассчитан-

ные по предложенной модели, для различных энергий соударения. Видно неплохое согласие с экспериментом.

На рис. 9 представлены результаты измерений методом совпадений, когда фиксируются заряды обоих партнеров соударения [10]. В экспериментах [42] фиксировался только заряд налетающей частицы, величина δ вычислялась как $\delta = 2m - 1$, т.е. предполагалось равенство $m = n$. Порог выдвигания $5f\sigma$ определен по данным работ [40, 47]. Резкое увеличение числа удаленных электронов происходит при достижении $R_0 = 0.28 \text{ \AA}$, что обусловлено выдвиганием $4f\sigma$ -орбитали и образованием двух вакансий в $L_{2,3}$ -оболочке. Как видно на рис. 9, отчетливо проявляются пороги, связанные с выдвиганием различных орбиталей. Можно констатировать, что модель двукратного возбуждения с добавлением поправок на энергии образования L-вакансий успешно описывает данные эксперимента. Энергии образования вакансий в ионах аргона различной зарядности были рассчитаны в [48]. Было показано, что энергия перехода на $2p$ -вакансию практически не меняется с изменением зарядности иона и хорошо согласуется с измерениями [10, 14]. При расстоянии менее $0.1 \text{ \AA}$ происходит дальнейший рост неупругой потери энергии. Как показал анализ, проведенный в работе [1], большие неупругие потери энергии при достижении расстояний, меньших $0.1 \text{ \AA}$ можно объяснить только образованием как минимум 4–6 внутренних вакансий, что согласуется с нашими представлениями о выдвигании при этих расстояниях $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей.

В рамках вышеописанной модели удастся объяснить также наблюдаемые природные ширины линий в спектре потерь при образовании $L_{2,3}$ -вакансий. Как следует из эксперимента [14], распределение по заряду описывается кривой с полушириной $\Delta n \approx 1$. Соответственно и ширина линии примерно равна разности энергий возбуждения для этих состояний.

3. ОБРАЗОВАНИЕ К-ВАКАНСИЙ

3.1. Исследования образования и распада К-вакансий

Образование вакансий в К-оболочках при атомных столкновениях было обнаружено при исследовании спектров неупругих потерь энергии [12, 49, 50]. Распад образовавшихся вакансий приводит к появлению характеристического оже-пика в спектрах электронов и характеристического излучения. Эти

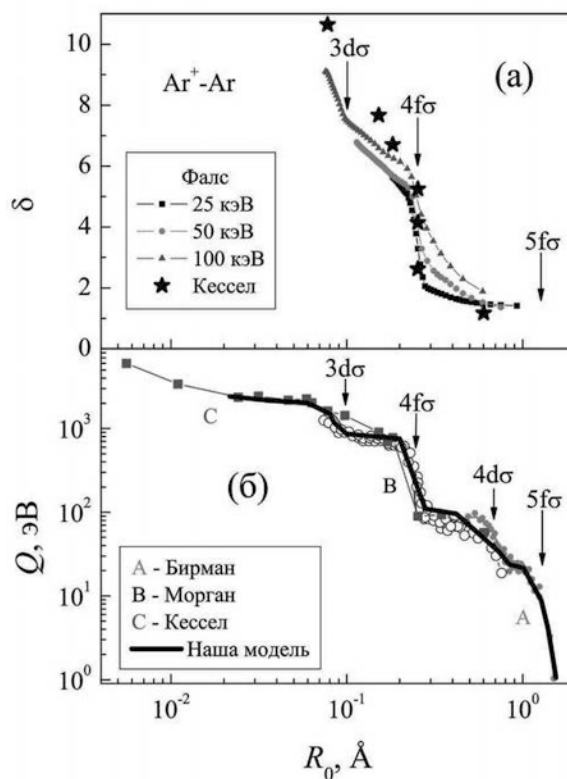


Рис. 9. Число удаленных электронов δ и неупругой потери энергии для системы Ar^+-Ar в зависимости от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Стрелками указаны пороги выдвигания различных орбиталей. На рис. 9а звездочки — измерения методом совпадений [10]. Кривые с точками — данные работы [42]. На рис. 9б приведены данные из работ [10, 40, 45, 46]. Жирная сплошная линия — наша модель

процессы изучались в работах [34, 51] и в наших работах. На рис. 10 представлены данные о сечениях эмиссии характеристических оже-электронов и излучения.

Полученные нами данные хорошо согласуются с данными экспериментов [24, 51, 52]. Для случая $\text{N}-\text{N}_2$ приведены также данные о сечениях образования К-вакансий, полученные нами путем обработки данных [49] зависимости вероятности образования К-вакансий $P(b)$ от параметра удара b с помощью формулы (2). Как видно на рис. 10, сечения образования К-вакансий совпадают с измерениями сечений выхода характеристических оже-электронов. Как и в случае заполнения L-вакансий, оже-переход является основным каналом распада К-вакансий. В рассматриваемых столкновениях выход флюоресценции мал, составляет $10^{-3}-10^{-2}$ и может зависеть

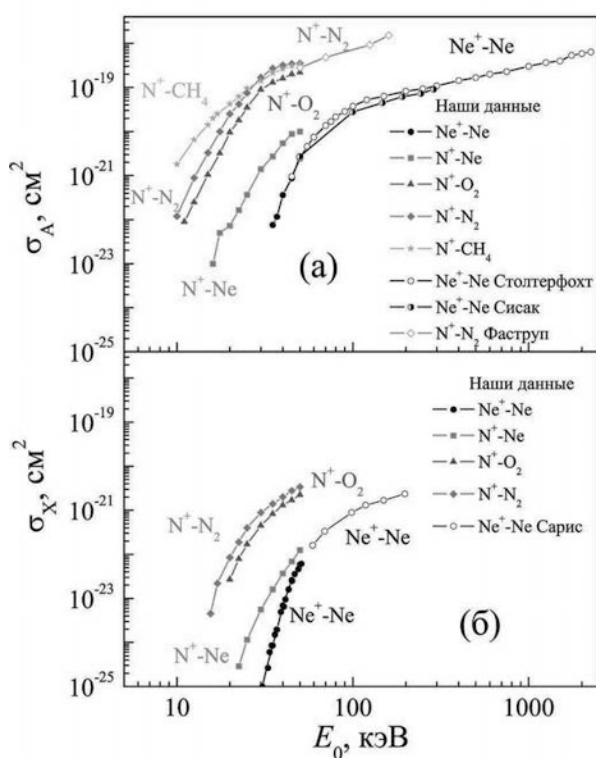


Рис. 10. Сечения эмиссии оже-электронов (а) и характеристического излучения (б) при заполнении К-вакансий. Приведены данные наших измерений, а также данные работ [24, 51, 52] для Ne^+-Ne . На рис. 10а показаны сечения образования К-вакансий при столкновениях N^+-N_2 (открытые кружки). Использованы данные из работы [49]

от энергии соударения (см. рис. 11).

Как видно на рис. 11, выход флюоресценции в случае Ne^+-Ne меняется незначительно и соответствует теоретическим предсказаниям. В случае N^+-N_2 он резко падает при уменьшении скорости соударения. На наш взгляд, это означает, что при малых энергиях происходит образование выстроенных по спину состояний, при этом спин вакансии противоположен спину наружных электронов. Как известно, согласно правилу Хунда состояние с максимальным полным спином имеет наименьшую энергию. Именно такое состояние и возникает вблизи порога образования вакансий. Радиационный распад вакансии в этом случае запрещен. С ростом скорости соударения происходит перемешивание состояний с различными значениями спина и выход флюоресценции стремится к теоретической оценке. В работе [56] эта зависимость была объяснена количественно. Интерес к изучению образования К-вакансий сохра-

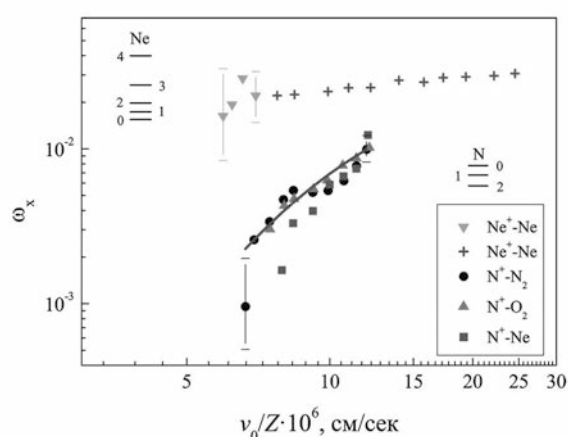


Рис. 11. Зависимость выхода флюоресценции от скорости соударения частиц для столкновений N^+-N_2 и Ne^+-Ne [53]. Короткими линиями приведены теоретические значения выхода флюоресценции в ионах различной зарядности [54, 55]. Сплошная линия — учет перемешивания состояний с различными спинами согласно [56]

няется до сих пор. В недавних работах [57–62] основное внимание уделяется коррелированным переходам и каскадам при распаде К-вакансий, а также образованию К-вакансий в релятивистском случае.

3.2. Скейлинги для расчета сечений образования К-вакансий

Разработка скейлинга для расчета сечений образования К-вакансий, так же, как и в случае образования L-вакансий, представляет интерес для анализа состава вещества при ионном облучении и для расчетов торможения частиц в веществе. Имеются два принципиально разных случая. При наличии вакансий на $2p\pi$ -орбитали образование К-вакансий было объяснено в работе [63] вращательными переходами с $2p\pi$ - на $2p\sigma$ -орбиталь (см. рис. 1). При больших межъядерных расстояниях $2p\pi$ -орбиталь формируется из $2p$ -оболочки более тяжелого партнера столкновения. На этой орбитали может быть некоторое количество вакансий, которое удобно характеризовать фактором f , равным отношению числа вакантных мест к полному числу электронов $2p$ -оболочки. Вследствие вращательных переходов в пределах объединенного атома при тесном сближении частиц эти вакансии могут перейти на $2p\sigma$ -орбиталь, а при разлете частиц оказываются в К-оболочке более легкого партнера соударения.

Сечение пропорционально фактору f , отражающему вероятность наличия вакансии на

2рп-орбитали, которая формируется из 2р-оболочки партнера соударения с большим Z . В статическом случае фактор f_s равен 2/3 числа вакансий на 2р-уровне партнера с большим Z , а для случая одинаковых атомов 1/3 от суммы числа 2р-вакансий в партнерах соударения. Зависимость вероятности образования К-вакансии от фактора f была проверена экспериментально [50]. При столкновениях Ne-Ne 2рп-орбиталь полностью заполнена, а при столкновениях Ne⁺-Ne и Ne₂⁺-Ne на орбитали имеется соответственно одна и две вакансии. Как было показано экспериментально [49], вероятность образования К-вакансии при одинаковых условиях соударения соотносится как 0.06 : 1 : 2. Это означает, что помимо статической вероятности f_s иметь вакансию на 2рп-орбитали может происходить дополнительное образование вакансий вследствие связи 2рп-орбитали с верхними незаполненными уровнями, описываемое фактором f_d . Таким образом, значение фактора $f = f_s + f_d$ складывается из статической вероятности иметь вакансию на 2рп-орбитали f_s и динамической поправки f_d , которая описывается формулой $f_d = A \exp(-c/v)$. Значения параметров A и c для исследованных случаев приведены в нашей работе [64].

На основе модели [63] можно предложить скейлинг для сечения образования К-вакансий:

$$\sigma_{vac}(E_{cms}) = f\pi R_{2p}^2 F\left(\frac{E_{cms}}{(Z_1 + Z_2 - \delta)^2}\right), \quad (4)$$

где E_{cms} — энергия соударения в системе центра масс, R_{2p} — радиус 2р-оболочки объединенного атома, $R_{2p} \sim (Z_1 + Z_2 - \delta)^{-1}$, Z_1 и Z_2 — заряды ядер сталкивающихся атомов, $\delta = 4$ — поправка на экранировку 2р-оболочки электронами 1s- и 2s-оболочки объединенного атома. Логарифм функции F дается выражением

$$\lg(F) = -15.767 - 4.493 \exp\left(-\frac{x}{0.069}\right) - 1.128 \exp\left(-\frac{x}{1.564}\right) - 8.522 \exp\left(-\frac{x}{0.026}\right),$$

где

$$x = \frac{E_{cms}}{(Z_1 + Z_2 - \delta)^2}.$$

Как видно на рис. 12а, предложенный скейлинг позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные единой универсальной кривой. Это позволит оценивать сечения ионизации К-оболочек для неисследованных экспериментально комбинаций сталкивающихся атомов.

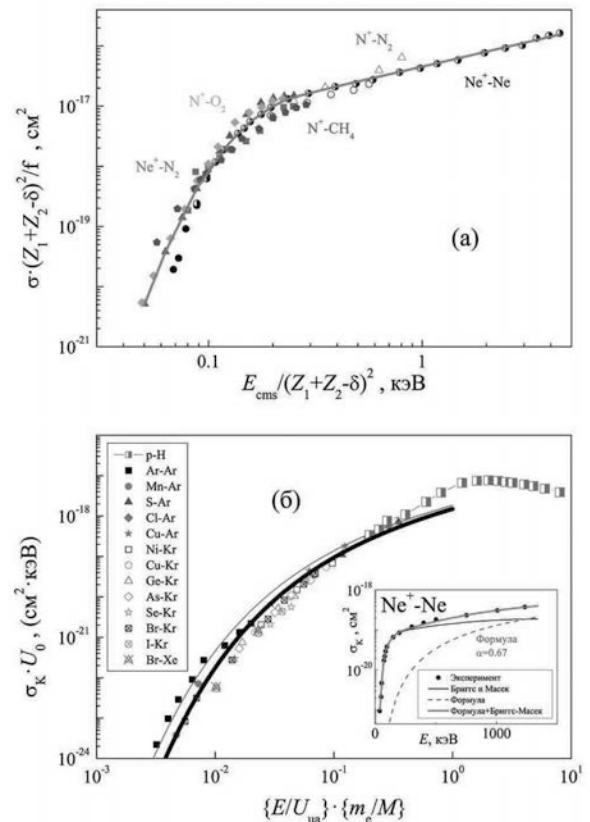


Рис. 12. а) Скейлинг для сечений образования К-вакансий при соударении легких атомов с $Z \leq 10$ при наличии вакансии на 2рп-орбитали. Точками на рисунке показаны экспериментальные данные из работ [23, 51, 72]. Жирная линия — предложенная нами универсальная кривая. б) Скейлинг для сечений образования К-вакансий при соударении атомов с $Z > 10$, когда 2р-оболочка полностью заполнена и образование вакансии обусловлено ионизацией 2рσ вследствие динамики соударения. Приведены экспериментальные данные для различных комбинаций сталкивающихся атомов из работы [66], а также для столкновений р-Н из [72]. Из-за различия в начальной заселенности 2рσ-уровня сечение ионизации в случае р-Н умножено на 4. Тонкой сплошной линией приведена кривая для случая $\alpha(0) = 0.67$. Жирной сплошной линией приведена кривая для $\alpha(0) = 0.75$, которая наилучшим образом описывает эксперимент. На вставке к рисунку приведен вклад рассматриваемых механизмов в образование К-вакансий при столкновениях Ne⁺-Ne. Как видно, суммарная кривая хорошо согласуется с экспериментом [51]

Следует также иметь в виду, что К-вакансия, образовавшаяся в легком партнере соударения, может перейти на К-оболочку более тяжелого партнера вследствие динамической связи 2рσ- и 1sσ-состояний, так называемый механизм распределе-

ния вакансий (vacancy sharing mechanism). Вероятность этого процесса может быть оценена по формулам, предложенным в работе [65].

При столкновениях атомов и ионов с $Z > 10$ $2p\pi$ -орбиталь заполнена и переходы с $2p\sigma$ - на $2p\pi$ -орбиталь невозможны. Делались неоднократные попытки [66–68] предложить эмпирические скейлинги для образования К-вакансий для этого случая. Однако сами авторы указывали на отсутствие теоретического объяснения данного явления. Решение было найдено в нашей работе [69].

В работе [70] исследовалось поведение термов квазимолекулы в комплексной плоскости межъядерных расстояний. Было обнаружено существование точек ветвления, связывающих различные термы. В рамках этой теории вероятность перехода электрона в континуум рассчитывается как интеграл по обходу точек ветвления. В рамках данного подхода в нашей работе [64] было получено выражение для сечения ионизации

$$\sigma_i = \pi P \frac{v}{\alpha(Z_{eff}) U_0} \exp\left(-\frac{\alpha(Z_{eff})}{v}\right). \quad (5)$$

Здесь P — число электронов на уровне $2p\sigma$, U_0 — значение энергии $2p$ -уровня в пределе объединенного атома. Для системы р-Н нужно учитывать, что орбиталь $2p\sigma$ заполнена с вероятностью $P = 50\%$. В случае столкновений сложных атомов на орбитали $2p\sigma$ находятся два электрона ($P = 2$). Величина

$$\alpha(Z_{eff}) \approx \alpha(0)(2U_0)^{0.5}.$$

Параметр

$$\alpha(0) = 2/3U_0 \text{Im}R_0,$$

где $\text{Im}R_0$ — положение точки ветвления для системы р-Н. Положение точки квазипересечения терма $2p\sigma$ с континуумом для системы р-Н было вычислено в работе [71], при этом $\text{Im}R_0 = 1.01$ и $U_0 = 0.5$. Таким образом, для системы р-Н $\alpha \approx 0.67$. Для сравнения с экспериментом удобно ввести переменную x :

$$x = \frac{m_e E}{M U_0}, \quad (6)$$

где m_e/M — отношение массы электрона к массе налетающей частицы, E — энергия соударения, и формулу для сечения переписать в виде

$$\sigma_i [\text{см}^2] U_0 [\text{кэВ}] = K \frac{\sqrt{x}}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}}\right), \quad (7)$$

где константа $K = 1.196 \cdot 10^{-18}$.

На рис. 12б показана зависимость приведенного сечения от приведенной энергии для различных

экспериментально исследованных комбинаций сталкивающихся частиц. Видно, что в этих координатах экспериментальные точки для большинства случаев ложатся на общую кривую. На этом же рисунке изображено сечение ионизации для столкновений р-Н, умноженное на 4. Видно, что эта зависимость также очень хорошо согласуется с первой группой экспериментальных данных и формулой (7). Видно также, что область применимости предложенной формулы ограничена диапазоном $x < 1$. Величина $x^{0.5}$ есть отношение скорости соударения к скорости электронов на $2p$ -уровне объединенного атома.

Интересно сопоставить два возможных механизма образования К-вакансий. Как видно на вставке к рис. 12б, расчет сечения образования К-вакансий в системе Ne^+-Ne , выполненный в работе [63], при энергиях свыше 200 кэВ дает значения сечений ниже эксперимента [51]. Учет поправки на ионизацию $2p\sigma$ -орбитали вследствие переходов в континуум с использованием формулы (7) приводит к практически полному совпадению с экспериментом. Таким образом, при оценке сечения образования К-вакансий необходимо учитывать оба механизма.

При небольших энергиях соударения в образовании К-вакансий доминирует механизм, связанный с переходами между орбиталями, с ростом энергии возрастает роль образования вакансий вследствие динамической ионизации $2p\sigma$ -уровня, и при больших энергиях необходимо учитывать оба механизма. Следует принимать во внимание специфику столкновений атомов в газовой и твердой фазах. При столкновениях в твердой фазе имеет место каскад соударений и может происходить дополнительное образование вакансий во внешних оболочках, которые могут дожить до следующего соударения и привести к большим сечениям образования К-вакансий вследствие разрешенной возможности $2p\sigma$ – $2p\pi$ -переходов.

4. ВОЗБУЖДЕНИЕ М-ОБОЛОЧЕК

При возбуждении М-оболочек сталкивающихся атомов в спектрах потерь энергии появляются дискретные линии с разными порогами возбуждения. В случае возбуждения М-оболочек выдвигаются несколько орбиталей ($5f\sigma$, $5g\sigma$, $6h\sigma$ и т. д.), что приводит к образованию автоионизационных состояний.

Как видно на рис. 13, при достижении межъядерного расстояния $0.6 \text{ \AA}$, соответствующего возбуждению $3d$ -оболочки, происходит резкое измене-

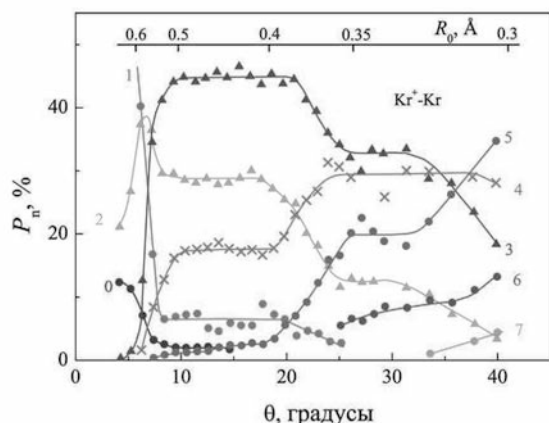


Рис. 13. Зависимость вероятности вылета частицы в различном зарядовом состоянии от угла рассеяния [41]

ние зарядовых состояний налетающей частицы, связанное с образованием и распадом двух $3d$ -вакансий. При более тесном сближении частиц происходит дальнейшее возбуждение частиц, связанное с перестройкой молекулярных оболочек. Вероятность образования вакансий в зависимости от достигнутого межъядерного расстояния ведет себя аналогично случаю возбуждения двух $2p$ -вакансий и может быть описана формулой (1) с изменением параметров R_b и γ .

Как показано в работе [73], в спектрах электронов при столкновениях $\text{Kr}-\text{Kr}$ наблюдаются дискретные линии, связанные с образованием $3d$ -вакансий и их распадом в атомах Kr после столкновения. Сечения эмиссии этих электронов согласуются с сечениями образования $3d$ -вакансий, определенных по данным о неупругих потерях энергии [74]. Пики при энергиях электронов от 60 до 80 эВ связаны с образованием $3p$ -вакансий [73].

При больших энергиях электронов в спектрах наблюдается широкая полоса, которая связана с заполнением вакансий во время столкновения. Это явление будет обсуждаться ниже.

Для оценки сечения ионизации в случае возбуждения M -оболочек может быть использован подход, аналогичный рассмотренному ранее для выдвижения $4f\sigma$ -орбитали. Сечения ионизации в данном случае известны только для столкновений Ag^+-Ag и Kr^+-Kr . Для столкновений Ag^+-Ag наблюдались автоионизационные состояния с энергиями 14, 28 и 50 эВ [40].

Для столкновений K^+-Ar соответствующие энергии состояний составляют 26, 28.5 и 30.5 эВ

[75]. Энергия состояния в случае образования вакансий в $3d$ -оболочке при столкновениях Kr^+-Kr составляет 130 эВ [74]. Известны также пороги возбуждения M -оболочки (приведены на рис. 3). Поскольку характер зависимости $W(R_0)$ в случае образования $3d$ -вакансий аналогичен рассмотренному выше случаю образования $L_{2,3}$ -вакансий, формулы (1), (2) могут быть использованы для оценки сечения ионизации и в случае возбуждения M -оболочки с коррекцией значений R_c и γ .

Заклячая раздел, можно констатировать, что формирование неупругих потерь в столкновениях многоэлектронных атомов кэВ-энергий вследствие образования внутренних K -, L - и M -вакансий убедительно подтверждается всей совокупностью экспериментальных и теоретических данных, а доминирующим механизмом потерь является образование автоионизационных состояний вследствие выдвижения МО. Стоит сталкивающимся атомам сблизиться до расстояний, отвечающих перекрытию их электронных оболочек, как с высокой вероятностью (для L - и M -оболочек — близкой к 1) происходит возбуждение автоионизационных состояний.

5. ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Квазимолекулярная модель объяснила высокие вероятности образования внутренних вакансий за счет выдвижения заполненных орбиталей. Однако, если группа заполненных электронами внутренних орбиталей выдвигается вверх, к границе непрерывного спектра, то другая группа вакантных орбиталей, формирующихся из незаполненных наружных электронных оболочек атомов, снижается при сближении частиц. Несмотря на короткое время акта соударения и соответственно время «жизни» квазимолекулы (10^{-15} – 10^{-16} с), возможен распад вакансий на снижающихся уровнях.

В 1972 г. [76] была обнаружена широкая полоса в спектре рентгеновского излучения $E_x = 0.5$ – 1.5 кэВ, возбуждаемого при бомбардировке ионами Ar твердых мишеней из C , Al , Si , Fe , которая не могла быть объяснена характеристическими переходами в атомах, участвовавших в столкновении. Полоса была интерпретирована как результат радиационных переходов в квазимолекуле. Образовавшиеся в ионе Ar в первом столкновении $2p$ -вакансии во втором столкновении переходят на квазимолекулярную $2p\pi$ -орбиталь и распадаются в процессе столкновения.

Аналогичные полосы вскоре были обнаружены различными исследовательскими группами [77–83]. После обнаружения квазимолекулярного излучения практически сразу были высказаны предложения использовать результаты измерений спектров для определения энергий уровней квазимолекулы. Интерес к таким исследованиям особенно подогревался перспективой изучать электронную структуру сверхтяжелых атомов.

Оже-переходы в квазимолекуле были обнаружены в нашей работе 1976 г. при изучении столкновений Kr–Kr [84]. На вставке к рис. 14 показаны энергетические спектры электронов, образующихся в столкновениях $\text{Kr}^+ - \text{Kr}$. Широкая полоса в спектре электронов, простирающаяся до сотен эВ, связана с распадом вакансий в квазимолекуле, т. е. во время соударения. Её происхождение обусловлено оже-переходами на вакантную орбиталь, формирующуюся из наружного $4p$ -уровня иона криптона и снижающуюся при уменьшении межъядерного расстояния. Несмотря на "доминирующий" (в логарифмическом масштабе) вклад квазимолекулярных электронов в формирование электронного спектра, реальный вклад в сечение ионизации составляет около 10%. Отметим, что сам факт обнаружения и исследования таких электронов явился следствием применения рекордной по своей чувствительности методики измерений. В последующих работах были исследованы разные комбинации сталкивающихся частиц при нескольких начальных энергиях. В пользу квазимолекулярной природы обнаруженных электронов свидетельствовали:

- 1) непрерывный характер спектра в широком (сотни эВ) диапазоне энергий электронов,
- 2) смещение высокоэнергетического склона полосы в сторону больших энергий электронов с уменьшением достижимого расстояния (с увеличением E_0),
- 3) смещение полосы в сторону меньших энергий E_e с уменьшением суммарного заряда ядер сталкивающихся частиц (в столкновениях ионов Kr^+ , Ar^+ , N^+ с атомами Kr).

Самым убедительным доказательством квазимолекулярного происхождения широкой полосы явились последовавшие вскоре эксперименты по совпадениям „электрон — рассеянный ион“, в которых экспериментально фиксировались энергия испущенного электрона и угол вылета рассеянного иона. Задание угла вылета иона позволяло из всего множества актов эмиссии выделить столкновения с заданным параметром удара (с заданной траекторией) и

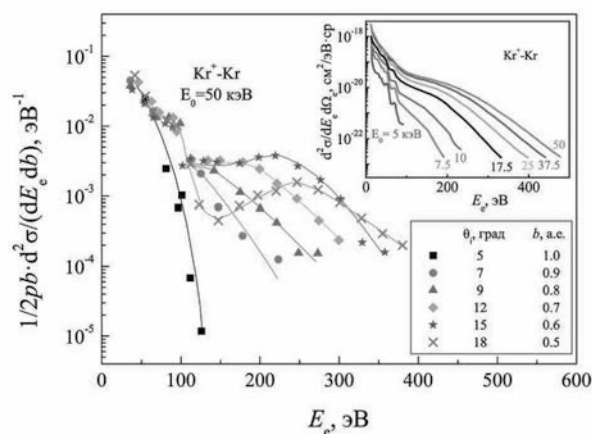


Рис. 14. Спектры электронов, измеренные методом совпадений с рассеянной частицей при различных параметрах удара для системы $\text{Kr}^+ - \text{Kr}$ [85]. На вставке в верхнем углу приведены спектры, измеренные без применения метода совпадений [84]. Цифры у кривых — энергии соударения в кэВ

соответственно с фиксированным расстоянием наибольшего сближения.

Выделение траектории столкновения позволило применить квантово-механическую модель эмиссии из квазимолекулы [86]. В этой модели при параболической зависимости энергии терма от времени в окрестности точки поворота R_0 спектр оже-электронов выражается через функцию Эйри $A_i(x)$:

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e db} = 4\pi^2 b \Gamma_A n \alpha^{-\frac{2}{3}} \times A_i^2 \left\{ \alpha^{-\frac{1}{3}} \left[E_e - E_e(R_0) + \frac{i}{2} \Gamma_A \right] \right\}, \quad (8)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{dE}{dR} \frac{d^2R}{dt^2}, \quad R = R_0,$$

n — число вакансий на орбитали. Приближение (8) получило название простого приближения Эйри. Согласно (8), при энергиях электронов, отвечающих переходам в точке R_0 , в спектре должен существовать главный максимум. Аргумент функции Эйри обращается в нуль при $E_e = E_e(R_0)$, поскольку вкладом мнимой части, как правило, можно пренебречь. При энергиях $E_e > E_e(R_0)$ спектр экспоненциально убывает. Наличие электронов в классически запрещенной области энергий связано с принципом неопределенности и получило название "столкновительного уширения". В разрешенной области $E_e < E_e(R_0)$ могут проявляться осцилляции из-за

интерференции амплитуд переходов на двух ветвях траектории — при сближении и при разлете частиц.

В экспериментах с применением метода совпадений (см. рис. 14), в отличие от широкой полосы, в спектре наблюдался главный максимум Эйри, который смещался при изменении угла рассеяния иона (параметра удара) [85].

Обнаружение оже-переходов в квазимолекуле открыло возможность определения поведения молекулярных уровней $E(R)$ в зависимости от межъядерного расстояния R из экспериментальных спектров электронов. Максимальная энергия электронов в полосе при фиксированной начальной энергии E_0 отвечает переходам при минимальных межъядерных расстояниях, достижимых в таких столкновениях. По такой процедуре были восстановлены автоионизационные уровни квазимолекул, образуемых в столкновениях Kr^+-Kr и Ar^+-Kr .

Существенное повышение точности определения энергий квазимолекулярных уровней было достигнуто благодаря применению упомянутого выше метода регистрации электронов по совпадениям с рассеянными ионами. Ход экспериментальной орбитали в зависимости от межъядерного расстояния $E(R)$ восстанавливался по положению максимума в спектрах оже-электронов $d^2\sigma/dE_e db$, измеренных при различных расстояниях наибольшего сближения R_0 . Выполнен ряд расчетов МО для системы $\text{Kr}-\text{Kr}$ [18, 87, 88]). Экспериментальные уровни близки к расчетным МО [88], переходящим в $4p$ -уровень объединенного атома Hf . Определенные из спектров $d^2\sigma/dE_e db$ и $d^2\sigma/dE_e$ уровни квазимолекулы $\text{Kr}-\text{Kr}$ удовлетворительно согласуются между собой. Следует учитывать, что при определении уровня квазимолекулы без применения метода совпадений вклады переходов на различные вакантные орбитали суммируются (в рассматриваемом случае суммируются переходы при заполнении вакансий на $4p\pi$ - и $4d\delta$ -орбиталях).

Из абсолютных величин сечений были оценены ширины автоионизационных уровней Γ_A . Сечения оже-ионизации в квазимолекулах $\text{Kr}-\text{Kr}$ и $\text{Ar}-\text{Kr}$ лежат в диапазоне $10^{-16} - 10^{-17} \text{ см}^2$. Переход от измеряемых сечений $d^2\sigma/dE_e d\Omega_e$ к сечениям $d\sigma/dE_e$ осуществлялся в предположении об изотропном в системе центра масс угловом распределении квазимолекулярных электронов. Оказалось, что величины Γ_A достигают порядка 10^{16} с^{-1} в случае Kr^+-Kr и порядка 10^{15} с^{-1} в случае Ar^+-Kr , т.е. время жизни вакансий оказывается сравнимым с временем столкновения, и, как следствие, вакансии с заметной вероятностью успевают распасться в квазимолеку-

ле. Причиной столь большой ширины автоионизационных уровней могут быть возрастание в квазимолекуле числа электронов на верхних уровнях за счет выдвигания заполненных орбиталей, способных участвовать в оже-переходах, а также увеличение перекрывания волновых функций состояний, между которыми осуществляется переход (аналогично переходам Костера–Кронига). Эффект увеличения Γ_A в квазимолекуле был продемонстрирован на модельных расчетах [89, 90]. Сочетание высокой вероятности образования вакансий и большой ширины автоионизационного уровня приводит к значительным сечениям эмиссии электронов из квазимолекулы. Вероятность образования автоионизационных состояний в квазимолекуле оказывается близкой к единице как вследствие снижения вакантных МО, так и за счет выдвигания заполненных МО под границу непрерывного спектра, что приводит к появлению над вакантными уровнями уровней, заселенных электронами.

Для квазимолекулы $\text{Kr}-\text{Kr}$ и $\text{Ar}-\text{Kr}$ было исследовано столкновительное уширение квазимолекулярных оже-спектров в зависимости от скорости столкновения в диапазоне начальных энергий $E_0 = 10 - 500 \text{ кэВ}$. Столкновительное уширение принято характеризовать величиной Γ_{cb} , равной энергетическому интервалу, на котором сечение уменьшается в 2 раза по сравнению со значением в точке $E_e(R_0)$. Столкновительное уширение было впервые исследовано для радиационных переходов в квазимолекуле. Однако эксперименты не смогли отчетливо выделить одну из зависимостей $\Gamma_{cb} \sim v_0^{1/2}$, $v_0^{2/3}$ или v_0^1 , предсказываемых различными моделями. Этот вопрос удалось выяснить в случае оже-эмиссии [91], было показано, что экспериментальная Γ_{cb} подчиняется соотношению $\Gamma_{cb} \sim v_0^{2/3}$, которое следует из модели, предложенной в работе [86].

Существенным шагом вперед явилась оже-спектроскопия легких квазимолекул, образующихся в столкновениях Ne^+-Ne и O^+-O_2 при энергиях $E_0 = 5 - 50 \text{ кэВ}$ в диапазоне параметров удара $b = 0.2 - 1.4 \text{ а.е.}$. Наличие точных расчетов молекулярных орбиталей для небольшого числа легких квазимолекул предоставляло возможность непосредственного сравнения результатов теории и эксперимента.

На рис. 15 представлены спектры электронов, измеренные для случая $\text{Ne}-\text{Ne}$. Как было показано в нашей работе [44], часть спектра экспоненциальной формы связана с образованием автоионизационного состояния при выдвигании $4f\sigma$ -орбитали и после-

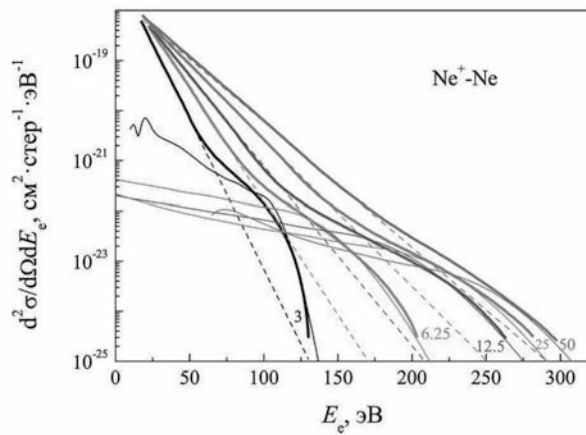


Рис. 15. Спектры электронов при столкновениях Ne^+-Ne [44]. Штриховые линии — вклад экспоненциальной составляющей, тонкая сплошная кривая — расчет вклада оже-переходов в квазимолекуле с использованием формулы (8)

дующим переходом высоковозбужденных электронов в континуум вследствие динамики соударения (см. следующий раздел). Широкая полоса при больших энергиях электронов связана с оже-переходами в квазимолекуле на снижающуюся при сближении частиц $2p\pi$ -орбиталь.

Как видно на рис. 15, этот канал доминирует при энергиях электронов выше 2 а.е. Как показано в работах [44, 84, 85], анализ формы спектра и ее изменения с ростом энергии соударения позволяет из эксперимента получить зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Данные работ [44, 85] находятся в хорошем согласии с данными расчетов энергий молекулярных орбиталей [18] (см. рис. 16). Хорошо согласуются также экспериментальная и расчетная $2p\pi$ -орбитали в случае квазимолекулы $\text{O}-\text{O}$ [85].

На орбитали $2p\pi$ имеется вакансия. Орбиталь $2s\sigma$ заполнена, так как формируется из заполненных $2s$ -уровней сталкивающихся атомов.

В работе [18] были рассчитаны диаграммы МО для различных зарядовых состояний системы $\text{Ne}^{q+}-\text{Ne}$ ($q = 0, 2, 4$). Заполнение $2p\pi$ -вакансии может происходить с орбиталей $3p\sigma$ (на орбитали 2 электрона), $3d\sigma$ (2 электрона), $3d\pi$ (4 электрона). Мы предполагаем, что орбитали $3s\sigma$, $3p\pi$ и $3d\delta$ не содержат электронов, так как формируются при больших межъядерных расстояниях из незаполненных уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеются 6 вариантов начальных состояний для оже-

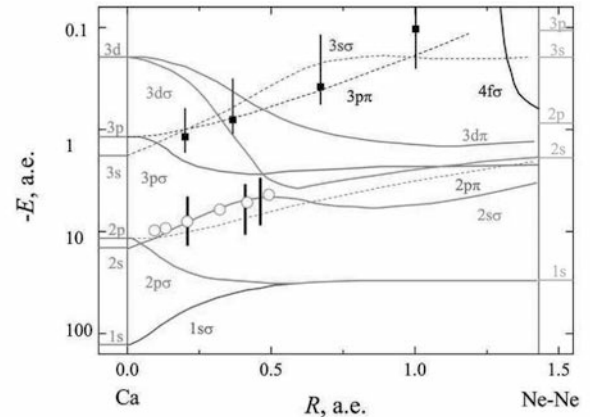


Рис. 16. Положение эффективного термина (точки), полученного из эксперимента [85], и диаграмма МО для системы $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$ [18]. Видно, что экспериментальные уровни согласуются с поведением в одном случае $2p\pi$ -, а в другом — $3p\pi$ - и $3s\sigma$ -орбиталей. Экспериментальные энергии $E_{2p\pi}$ показаны вертикальными линиями, высота которых соответствует неопределенности энергий связи наружных электронов, участвующих в оже-переходе. Открытые точки — данные работы [44] для канала $3d\pi^2 - 2p\pi\epsilon$, вносящего основной вклад в сечение. Рисунок взят из работы [44]

переходов: $3p\sigma^2 - 2p\pi\epsilon$ (под значком ϵ понимается улетающий электрон), $3d\sigma^2 - 2p\pi\epsilon$, $3d\pi^2 - 2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\sigma - 2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\pi - 2p\pi\epsilon$ и $3d\sigma 3d\pi - 2p\pi\epsilon$. В дальнейшем мы будем обозначать только начальное состояние. Энергии оже-переходов рассчитывались как разность энергий соответствующих орбиталей $E_i(R) = E_1(R) - E_2(R) - E_3(R)$.

Вероятность оже-перехода в единицу времени может быть получена как

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \chi_f^* \varphi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_i \varphi_i d\tau_1 d\tau_2 \right|^2, \quad (9)$$

где χ_i , ϕ_i — одноэлектронные волновые функции двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях, χ_f — волновая функция электрона на $2p\pi$ -орбитали, φ_f — волновая функция оже-электрона, т.е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор $e^2/r_{1,2}$ описывает кулоновское взаимодействие двух электронов. Для двух электронов с одинаковым направлением спина учитывалась прямая и обратная амплитуды переходов и их интерференция. Далее проводилось суммирование вероятностей перехода из состояний с различным спином и проекцией момента. В качестве волновых функций стационарных состояний электрона использовались водородоподобные волновые функции, при этом эф-

эффективный заряд Z_i менялся при изменении межъядерного расстояния в соответствии с изменением энергии орбитали. Выбор водородоподобных волновых функций оправдан тем, что рассматриваемые переходы происходят вблизи предела объединенного атома, и электроны находятся в поле значительно по величине эффективного заряда объединенного атома.

Сечение эмиссии электронов с энергией E_e можно рассчитать интегрированием выражения (8) по всем параметрам удара.

Как показано в работе [69, 92], при энергиях 3 кэВ имеется хорошее согласие расчета и эксперимента для сечений эмиссии оже-электрона при использовании вероятностей оже-переходов и энергий оже-электронов, рассчитанных для системы $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$. При энергии 6.25 кэВ для электронов с энергиями 3–4 а. е. также имеется согласие при использовании параметров системы $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$, а для электронов с энергиями 5–6 а. е. согласие достигается в большей степени при использовании вероятностей оже-переходов в системе $\text{Ne}^{4+}-\text{Ne}$. При энергиях 12.5–50 кэВ согласие с экспериментом достигается только при повышении степени ионизации квазимолекулы до $m = 6$. При этом под величиной m понимается суммарное число удаленных электронов из системы.

Таким образом, сопоставление эксперимента с расчетом позволяет сделать вывод, что распад $2p\pi$ -вакансии происходит в сильно возбужденной (ионизованной) системе, причем имеет место значительный рост ионизации частиц с увеличением энергии соударения.

Основной вклад при малых энергиях соударения дает переход $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$. С ростом энергии соударения подключается канал $3d\pi 3d\sigma$ и происходит сдвиг спектра электронов в сторону больших энергий. Однако вклад канала $3d\pi^2$ доминирует при всех изученных энергиях — вплоть до 50 кэВ. Вклад этого канала превышает 80%. Это позволяет определить вероятность указанного оже-перехода непосредственно из эксперимента (см. рис. 17).

Следует отметить, что с ростом ионизации партнеров соударения происходит сближение по шкале энергий положения возбужденных уровней $3p\sigma$, $3d\sigma$ и $3d\pi$ с уровнем $2p\pi$. Как показывает расчет, связанное с этим увеличение интегралов перекрытия волновых функций приводит к значительному росту вероятностей перехода.

Установленная закономерность — сильный рост степени ионизации системы при увеличении энергии соударения и соответственно уменьшении достигаемых межъядерных расстояний, должна учитывать-

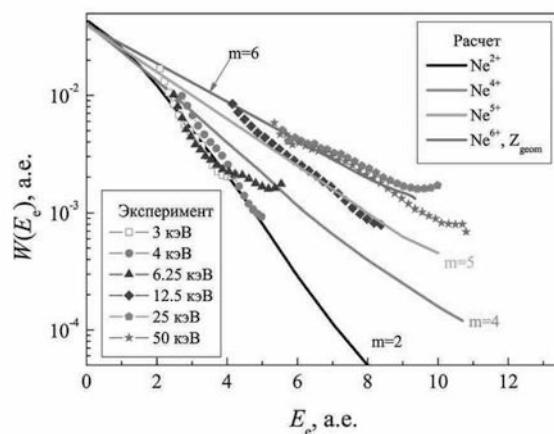


Рис. 17. Сопоставление расчетных значений вероятности оже-перехода для доминирующего канала $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$ при различных степенях ионизации системы m со значениями, полученными из эксперимента при различных энергиях соударения. Использованы данные работ [69, 92]

ся при моделировании торможения частиц в веществе, при анализе ионизации частиц при соударениях, эмиссии оже-электронов и характеристического излучения и других столкновительных процессов.

Теоретические расчеты оже-ширин квазимолекулярных уровней $\Gamma_A(R)$ помимо рассмотренного выше случая Ne^+-Ne выполнены лишь для небольшого числа самых простых квазимолекул. Для оже-переходов на $1s\sigma$ -уровень в квазимолекуле He^+-He экспериментальная ширина удовлетворительно согласуется с рассчитанной в работе [93] как по величине, так и по характеру зависимости от межъядерного расстояния. Для проверки модели оже-эмиссии измерены энергетические спектры электронов из квазимолекулы He^+-He с использованием методики совпадений, которые гораздо чувствительнее к выводам модели, чем спектры, проинтегрированные по всем возможным параметрам удара. В этом случае сравнение показало, что главный квазимолекулярный максимум с хорошей точностью описывается выражением (8): ширина максимума и экспоненциально убывающий высокоэнергетический участок спектра, вызванный столкновительным уширением, изменяются с увеличением скорости столкновения в полном соответствии с теорией.

Таким образом, квантово-механическая модель эмиссии оже-электронов из квазимолекулы, основанная на приближении Эйри, хорошо описывает оже-переходы в квазимолекулах He^+-He , $\text{O}-\text{O}$ и $\text{Ne}-\text{Ne}$. Модель нуждается в дальнейшем развитии для описания оже-переходов в тяжелых квазимолекулах

с большим числом электронов и сложной структурой уровней. Однако такое развитие может базироваться на установленной применимости модели для простых и легких квазимолекул.

Можно сделать вывод, что изучение автоионизационных переходов (оже-переходов) в квазимолекуле позволило оценить их вклад (хотя и достаточно скромный, менее 10%) в неупругие потери, а также оказалось чрезвычайно плодотворным для развития экспериментальной спектроскопии уровней и квантово-механической модели эмиссии из квазимолекулы.

6. РАЗДЕЛЕНИЕ ВКЛАДОВ ОЖЕ-ИОНИЗАЦИИ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ В ЭМИССИЮ ЭЛЕКТРОНОВ

В случае оже-распада $2p\pi$ -вакансий в квазимолекулах Ne–Ne и O–O было установлено, что модель, предложенная в работе [86], достаточно хорошо воспроизводит поведение спектра $d^2\sigma/dE_e db$ в зависимости от E_e . В то же время спектр квазимолекулы Kr–Kr заметно уширен по сравнению со спектром, предсказываемым моделью. Таким образом, вопрос о применимости модели потребовал дополнительных исследований. Кроме того, в эксперименте Вурли и др. [94] было установлено, что полное сечение эмиссии электронов с непрерывным распределением неуклонно растет с увеличением скорости столкновения (вплоть до $E_0 = 800$ кэВ), что не согласуется с выводами квазимолекулярной модели: с ростом скорости уменьшается время существования квазимолекулы и, как следствие, должен уменьшаться выход оже-электронов.

Спектры квазимолекулы Kr–Kr в столкновениях с $E_0 = 150, 450$ и 750 кэВ были исследованы при фиксированных параметрах удара [95]. Эксперимент показал, что увеличение с ростом E_0 сечения образования электронов с непрерывным энергетическим распределением связано с быстро возрастающим вкладом ионизации вследствие прямых переходов атомных электронов в непрерывный спектр.

В общем случае соотношение автоионизации и динамической ионизации зависит от параметров рассматриваемых термов квазимолекулы и скорости соударения. Разделение двух механизмов ионизации в квазимолекуле было основано на том, что сечения оже-ионизации и прямой ионизации должны по-разному зависеть от скорости столкновения. Для исследования была выбрана простая квазимолекула He^+-He , в которой с высокой вероятностью

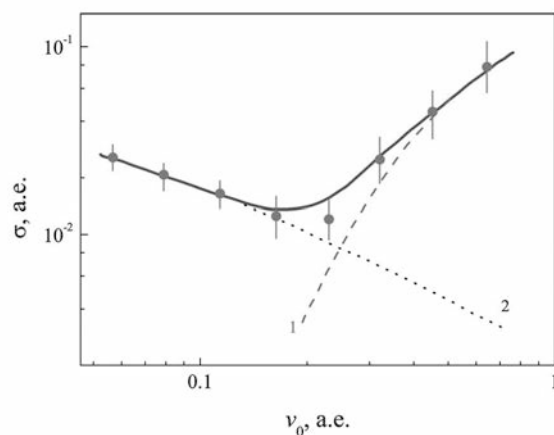


Рис. 18. Сечение эмиссии электронов с энергиями $E_e \geq 20$ эВ из квазимолекулы He^+-He в зависимости от скорости столкновения: 1 и 2 — расчет прямой и оже-ионизации соответственно. Использованы данные работы [96]

образуется $1s\sigma$ -вакансия. Спектры электронов были измерены в широком диапазоне энергий соударения $E_0 = 0.3\text{--}40$ кэВ [96]. На рис. 18 приведена экспериментальная зависимость сечения эмиссии квазимолекулярных электронов от скорости v_0 вместе с расчетными зависимостями для прямой и оже-ионизации. Видно, что оже-переходы доминируют при скоростях $v_0 \leq 0.25$ а.е., т.е. в области, где хорошо выполняется условие применимости квазимолекулярного приближения. При больших скоростях быстро увеличивается вклад прямых переходов электронов в континуум.

Природа непрерывной компоненты в спектрах электронов до сих пор является привлекательным объектом исследований, так как открывает возможности изучения влияния динамики соударения на наблюдаемые спектры. В работах [71, 97] рассчитывалось поведение термов $E_i(R)$ для системы H^+-H в комплексной плоскости межъядерного расстояния R . Как уже упоминалось, различные термы являются разными листами функции $E(R)$. При определенных точках R эти листы могут пересекаться, а вероятность перехода между различными термами может быть оценена вычислением интеграла по обходу этих точек, как это сделано в известной модели Ландау–Зинера. Было обнаружено наличие особенностей типа «штопора», которые связывают множество листов и обуславливают возможность перехода электрона в континуум. Это объяснило выдвижение адиабатического терма в континуум, несмотря на наличие кулоновского сгущения термов. За прошедшее время произошло значительное разви-

тие теории таких переходов. Было показано, что они могут быть обусловлены скрытыми пересечениями термов в комплексной плоскости межъядерного расстояния [71, 97]. Подробный обзор теоретических работ о данном механизме ионизации дан в работе [98]. Среди других исследований спектров электронов, выполненных недавно, следует упомянуть работы [99–104].

Детальное исследование вклада динамической ионизации при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ выполнено в нашей работе [44]. Как видно на рис. 15, при энергиях электронов менее 2 а. е. в спектрах доминирует непрерывная компонента экспоненциальной формы. Мы связали появление этой компоненты с ионизацией автоионизационного состояния, образующего при выдвигании терма $4f\sigma^2$, на котором находятся два электрона, в континуум.

В работе [105] для описания спектров электронов было предложено выражение

$$\sigma(E_e) = A(E_e) \exp\left(-\frac{\alpha(E_e)}{v}\right), \quad (10)$$

$$\alpha(E_e) = 2 \int_{E_p}^{E_e} \text{Im } R(E) dE, \quad (11)$$

$$A(E_e) = \frac{4\pi |R(E_e)|^2 \text{Im } R(E_e)}{\alpha(E_e)}. \quad (12)$$

Здесь $R(E_e)$ — обратная функция для зависимости энергии рассматриваемого состояния от межъядерного расстояния $E_e(R)$, $\text{Im } R(E_e)$ — мнимая часть этой функции, v — скорость соударения (используются атомные единицы).

Следуя методике, предложенной в работе [106], т. е. взяв отношение измеренных сечений для двух скоростей соударения, можно исключить влияние предэкспоненциального фактора и из экспериментальных данных получить функцию $\alpha(E_e)$:

$$\alpha(E_e) = -\ln \left\{ \frac{\sigma(E_e, E_1)}{\sigma(E_e, E_2)} \right\} \left[\frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_2} \right]^{-1} \quad (13)$$

Здесь v_1, v_2 — скорости соударения для двух рассматриваемых случаев.

Как видно на рис. 19, данные для различных пар скоростей хорошо укладываются на одну кривую. Зависимости $\alpha(E_e)$ обращаются в нуль при энергии $E_p = 17.5 \pm 1.0$ эВ, что свидетельствует о том, что ионизация происходит с автоионизационного уровня, находящегося в континууме. Значение E_p слабо зависит от использованной пары сечений. Полученное значение соответствует автоионизационному состоянию, образуемому вследствие выдвигания

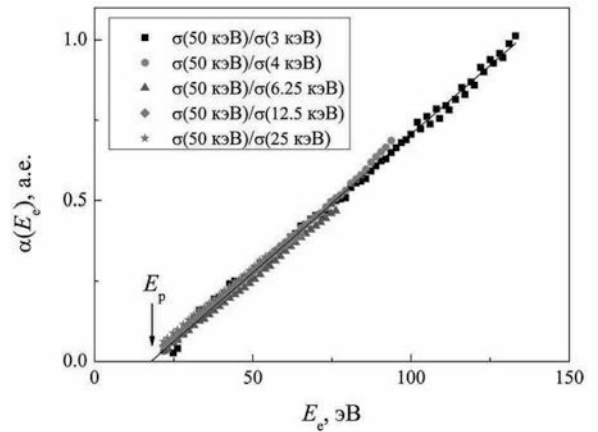


Рис. 19. Зависимость $\alpha(E_e)$, из отношения сечений, измеренных при разных энергиях соударения. Стрелкой указано значение $E_p = 17.5$ эВ, когда терм выходит в сплошной спектр. Рисунок взят из статьи [44]

терма $4f\sigma^2$ при достижении межъядерного расстояния $R_c = 1.3$ а. е.

Взяв производную от значения $\alpha(E_e)$ по энергии электрона, получим из эксперимента зависимость (в атомных единицах) $2 \text{Im } R(E_e) = 0.2301 \pm 0.0025 E_e$. Таким образом, $\text{Im } R(E_e)$ практически константа и слабо зависит от E_e , что расходится с теоретическими предсказаниями [70], согласно которым значение $\text{Im } R(E_e)$ должно уменьшаться с ростом E_e . Факт, что $\text{Im } R(E_e)$ практически константа приводит к экспоненциальной форме спектра. Такая форма спектра предполагает отсутствие интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. А это может происходить, если вероятность перехода в континуум высока, что имеет место в изучаемом случае.

Нами [44] для предэкспоненциального фактора было получено выражение

$$A(E_e) = 3\pi R_c^2 \exp(-\gamma E_e), \quad \gamma = 0.776.$$

Подобная зависимость не имеет пока теоретического объяснения и возможно связана с влиянием кулоновского поля ядер на волновую функцию эмитированного электрона.

Таким образом, показано, что появление экспоненциальной компоненты в спектре электронов согласуется с представлением о выдвигании автоионизационного терма в континуум. Высокая вероятность срыва электрона приводит к отсутствию интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц и, как следствие, к экспоненциальной форме спектра. Определены параметры авто-

ионизационного терма: $E_p = 17.5$ эВ, соотношение $\text{Im } R(E_e) = 0.23$ а.е. и $R_c = 1.3$ а.е., подтверждает наличие круто выдвигающегося $4f\sigma^2$ -терма.

Полное сечение ионизации получим, проинтегрировав $\sigma(E_e)$ по энергии электрона:

$$\sigma_i = 3\pi R_c^2 \left\{ \frac{\exp(-\gamma E_p)}{(\text{Im } R/E_e)v + \gamma} + [1 - \exp(-\gamma E_p)] E_p \right\}. \quad (14)$$

Значения, рассчитанные по формуле (14), находятся в хорошем согласии с измеренными сечениями ионизации [25, 27].

Спектры электронов, возникающие при динамической ионизации, и столкновительное уширение автоионизационной линии описываются весьма похожими выражениями, отражающими динамику соударения. Для вывода о вкладе автоионизации или динамической ионизации требуется привлечь дополнительную информацию.

Как видно на рис.8а, при достижении межъядерного расстояния R_c , соответствующего выдвигению $4f\sigma$ -орбитали, число удаляемых электронов δ при энергиях соударения 3–6 кэВ близко к 1, что соответствует распаду автоионизационного состояния. При энергии 50 кэВ число эмитируемых электронов δ увеличивается до 2. Это означает, что с ростом энергии соударения динамическая ионизация увеличивает вероятность перехода электрона в континуум, т.е. мы имеем картину, похожую на случай ионизации для более простой системы $\text{He}^+ - \text{He}$.

Таким образом, формирование автоионизационного терма, резко выдвигающегося при сближении частиц, что приводит к возможности переходов электронов в континуум вследствие динамики соударения, является основным каналом ионизации в рассматриваемом случае столкновений $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$. Как видно на рис. 15, динамическая ионизация и оже-переходы в квазимолекуле позволяют количественно описать спектры электронов и сечение ионизации при столкновениях атомов средних масс.

7. ВКЛАД ОБРАЗОВАНИЯ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ТОРМОЗНЫЕ ПОТЕРИ

В наших недавних работах [107–109] выявлена еще одна область атомной физики, где учет автоионизационных процессов может привести к кардинальному прогрессу в понимании явления, а именно, торможения атомов в твердом теле.

Обзор современного состояния работ по теории торможения частиц дан в [110, 111]. Как прави-

ло, теория удовлетворительно описывает потери при больших энергиях частиц и вблизи максимума сечения торможения. В работе [112] был предложен подход для описания тормозных потерь при медленных столкновениях. Однако имеются значительные расхождения теории с экспериментом. На наш взгляд, это связано с тем, что при медленных столкновениях игнорируется ионизация вследствие образования и распада автоионизационных состояний.

Электронная тормозная способность и неупругие потери энергии при столкновениях связаны как

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi}{V_0} \int [Q_0 + Q_1] W(b) b db. \quad (15)$$

Здесь V_0 — объем одного атома в твердой мишени, b — параметр удара, член Q_0 обусловлен возбуждением плазмонов и другими возбуждениями при прохождении частицы через мишень, а член Q_1 отражает вклад от ионизации частиц, $W(b)$ является вероятностью неупругого перехода. Как показано в нашей работе [107], формирование автоионизационных состояний вносит доминирующий вклад в тормозные способности при бомбардировке ионами твердых тел.

Значения электронных тормозных способностей dE/dx можно оценить, используя связь между сечением возбуждения автоионизационного состояния и сечением ионизации. Соотношение между сечением образования автоионизационного состояния σ_v и сечением ионизации σ_i имеет вид $\sigma_v = 1/N\sigma^{ion}$, где N — число электронов, образующихся при распаде автоионизационного состояния. Наконец, уравнение (15) можно переписать в виде

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{NV_0} \sum_{nlj} Q_{1nlj} \sigma_{nlj}^{ion}. \quad (16)$$

Поэтому для оценки вклада автоионизационных процессов в dE/dx необходимо знать значения Q_{1nlj} и сечений ионизации σ_{nlj}^{ion} .

На рис. 20 дано сравнение электронных тормозных способности dE/dx для случая столкновений ионов Ar с твердым Ar, рассчитанных по формуле (16), с значениями из базы данных SRIM [113].

Сечения ионизации для случая $\text{Ar}^+ - \text{Ar}$ -столкновений взяты из работы [26, 27, 47]. В случае М-оболочки наблюдалось образование состояний с энергиями 14, 28 и 55 эВ [40]. Вклад образования вакансий в $L_{2,3}$ -оболочке также учитывался. Сечение образования $L_{2,3}$ -вакансий было получено из измерений сечения образования оже-электронов при распаде вакансии [23]. Энергия

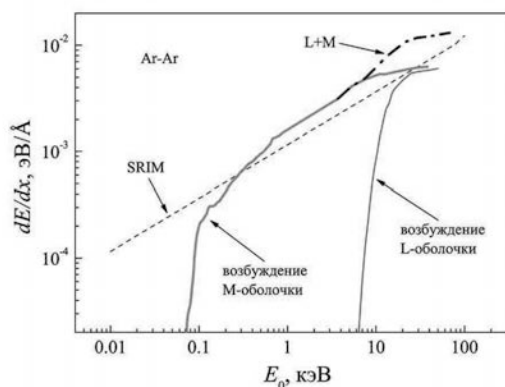


Рис. 20. Сравнение электронных тормозных потерь, представленных в базе данных SRIM, и наша оценка, основанная на сечении ионизации для случая Ar–Ar. Оценка возбуждения М-оболочки получена на основе сечений ионизации, взятых из [26, 27, 47]. Показан также вклад образования $L_{2,3}$ -вакансий [23]. Штрихпунктирная линия — сумма возбуждений L- и М-оболочек. Рисунок взят из работы [107]

образования L-вакансии была принята равной 340 эВ [28]. Штрихпунктирная линия на рис. 20 представляет собой сумму вкладов в электронную тормозную способность dE/dx от возбуждения L- и М-оболочек. Как видно, возбуждение L-оболочки увеличивает значение dE/dx в два раза. Этот рисунок также демонстрирует пороговое поведение электронной тормозной способности dE/dx . Как и в других рассмотренных случаях, предлагаемая модель предсказывает доминирующий вклад процессов формирования автоионизационных состояний и последующей ионизации в электронные тормозные способности dE/dx в рассматриваемом диапазоне энергий соударения, а также предсказывает пороговую зависимость dE/dx от энергии бомбардирующих ионов.

Для случаев, когда отсутствуют данные о сечениях ионизации, для их оценки можно использовать разработанные нами скейлинги. С помощью этого метода были сделаны оценки вклада ионизации L-оболочек для систем O–Al и Ne–Si [109]. Возбуждение L-оболочки в легком партнере соударения связано с выдвиганием $4f\sigma$ -орбитали, а в более тяжелом партнере — с выдвиганием $3d\sigma$ -орбитали. Величина неупругой потери энергии в канале, связанном с выдвиганием $4f\sigma$, составляла величину 35 эВ и 45 эВ для систем O–Al и Ne–Si соответственно. Величина Q для $3d\sigma$ -орбитали зависит от рассматриваемой энергии и оценивалась нами из экспериментально измеренной зависимости Q от межъядерного

расстояния [114].

В случае O–Al наш расчет вклада от выдвигания $3d\sigma$ и $4f\sigma$ -орбиталей хорошо согласуется с данными эксперимента [115] и расчетом [116] при использовании бинарной теории при описании взаимодействия частиц. Используя формулу из работы [117] для потери энергии при взаимодействии иона с газом свободных электронов в твердом теле, мы оценили вклад в потерю энергии при торможении ионов Ne на внешней оболочке Si. При $E = 10$ кэВ это значение составило всего 13% от полной величины сечения тормозных потерь.

Таким образом, перестройка уровней квазимолекулы и формирование автоионизационных состояний должны обязательно учитываться при расчете торможения частиц кэВ-энергий в веществе. Предложенный подход предсказывает пороговую зависимость сечения тормозных потерь от энергии бомбардирующих ионов, что не может объяснить ни одна из существующих теоретических моделей.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Рассмотрены имеющиеся экспериментальные и теоретические данные о формировании неупругих потерь энергии, о процессах ионизации, эмиссии электронов и квантов при столкновениях атомов в кэВ-диапазоне энергий. Предложена модель, описывающая связь процессов ионизации, образования вакансий во внутренних оболочках и наблюдаемых неупругих потерь. Сделан вывод, что возбуждение автоионизационных состояний является доминирующим механизмом неупругих потерь при столкновениях атомов кэВ-энергий.

2. Приведены результаты недавно опубликованных исследований по теме обзора: о механизме срыва электрона в континуум с выдвигающегося автоионизационного терма, о каналах оже-распада вакансий в квазимолекуле, позволившие добиться количественного описания сечений ионизации и спектров электронов, эмитируемых при столкновениях атомов кэВ-энергий.

3. Рассмотрена возможность определения сечений образования вакансий во внутренних оболочках для различных комбинаций атомов-партнеров столкновения расчетным путем. Разработаны скейлинги, позволяющие рассчитать сечения ионизации K-, L- и М-оболочек для произвольных комбинаций сталкивающихся атомов.

4. Показано, что теоретические модели, описывающие торможение ионов кэВ-энергий в веществе, должны обязательно принимать во внимание возбуждение автоионизационных состояний. Предсказана пороговая зависимость сечений тормозных потерь от энергии соударения.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. D. Garcia, R. J. Fortner, and T. M. Kavanagh, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 111 (1973).
2. Q. C. Kessel and B. Fastrup, *Case Studies in Atomic Physics* **3**, 137 (1973).
3. G. N. Ogurtsov, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 1 (1972).
4. J. S. Briggs, in *Fundamental processes in energetic atomic collisions*, Plenum Press, New York (1983).
5. В. В. Афросимов и др., *ЖТФ* **34**, 1613 (1964).
6. В. В. Афросимов и др., *ЖТФ* **34**, 1624 (1964).
7. В. В. Афросимов и др., *ЖТФ* **34**, 1637 (1964).
8. E. Everhart and Q. C. Kessel, *Phys. Rev. Lett.* **14**, 247 (1965).
9. Q. C. Kessel, A. Russek, and E. Everhart, *Phys. Rev. Lett.* **14**, 484 (1965).
10. Q. C. Kessel and E. Everhart, *Phys. Rev.* **146**, 16 (1966).
11. U. Fano and W. Lichten, *Phys. Rev. Lett.* **14**, 627 (1965).
12. Q. C. Kessel, M. P. McCaughey, and E. Everhart, *Phys. Rev.* **153**, 57 (1967).
13. B. Fastrup, G. Hermann, and K. J. Smith, *Phys. Rev. A* **3**, 1591 (1971).
14. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. М. Полянский, А. П. Шергин, *ЖЭТФ* **57**, 806 (1969).
15. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, А. П. Шергин, *Письма в ЖТФ* **39**, 80 (2013).
16. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, *NIMB* **354**, 142 (2015).
17. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев, *ЖЭТФ* **66**, 1933 (1974).
18. J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup, and K. Taulbjerg, *Phys. Rev. A* **14**, 707 (1976).
19. D. Schneider, G. Nottle, U. Wille, and N. Stolterfoht, *Phys. Rev. A* **28**, 161 (1983).
20. J. Mace, M. J. Gordon, and K. P. Giapis, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 257603 (2006).
21. A. N. Zinoviev, *NIMB* **269**, 829 (2011).
22. А. Н. Зиновьев, *Поверхность* **5**, 38 (2008).
23. Г. Г. Месхи, Дисс. ... канд-та физ.-матем. наук, ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград (1983).
24. R. K. Cacak, Q. C. Kessel, and M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* **2**, 1327 (1970).
25. R. C. Amme and P. O. Haugsjaa, *Phys. Rev.* **177**, 230 (1969).
26. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, *Proc. Roy. Soc. A* **238**, 334 (1957).
27. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, *Proc. Roy. Soc. A* **240**, 382 (1957).
28. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. М. Полянский, А. П. Шергин, *ЖЭТФ* **63**, 799 (1972).
29. F. W. Bingham, *Phys. Rev.* **182**, 180 (1969).
30. E. J. Knystautas, Q. C. Kessel, R. Del Boca, and H. C. Hayden, *Phys. Rev. A* **1**, 825 (1970).
31. R. K. Cacak and T. Jorgensen, *Phys. Rev. A* **2**, 1322 (1970).
32. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев, *Письма ЖЭТФ* **21**, 26 (1975).
33. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., *Письма ЖЭТФ* **21**, 535 (1975).
34. F. W. Saris, *Physica* **52**, 1327 (1971).
35. A. P. Shergin and Yu. S. Gordeev, *Proc. X Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Paris (1977).
36. V. V. Afrosimov and A. P. Shergin, *Proc. VI Int. Conf. on Atomic Physics. Invited Lectures and Progress Reports*, Riga (1978).
37. A. P. Shergin, *Proc. VI Int. School. on Physics of Ionized Gases-SPIG-78. Invited Lectures and Progress Reports*, Dubrovnik (1978).
38. M. H. Chen and B. Craseman, *Phys. Rev. A* **10**, 2232 (1974).
39. J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57 (1930).
40. D. J. Bierman and W. C. Turkenburg, *Physica* **67**, 533 (1973).
41. В. В. Афросимов и др., *ЖТФ* **36**, 123 (1966).
42. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba, and E. Everhart, *Phys. Rev.* **107**, 704 (1957).

43. P. R. Jones, P. Costigan, and G. Van Dyk, *Phys. Rev.* **129**, 211 (1963).
44. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, *ЖЭТФ* **159**, 56 (2021).
45. G. H. Morgan and E. Everhart, *Phys. Rev.* **128**, 667 (1962).
46. Q. C. Kessel, P. H. Rose, and L. Grodzins, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1031 (1969).
47. P. O. Haugslaa and R. C. Amme, *J. Chem. Phys.* **52**, 4874 (1970).
48. F. P. Larkins, *J. Phys. B* **4**, 1 (1973).
49. B. Fastrup, *Phys. Rev. A* **9**, 2518 (1974).
50. B. Fastrup, *J. Phys. B* **7**, L206 (1974).
51. N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch et al., *Phys. Rev. A* **12**, 1313 (1975).
52. F. W. Saris and D. Onderdelinden, *Physica* **49**, 441 (1970).
53. V. V. Afrosimov et al. *Proc. X Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Paris (1977).
54. C. P. Bhalla, *J. Phys. B* **8**, 2792 (1975).
55. M. H. Chen and B. Crasemann, *Proc. IX Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Seattle (1975).
56. M. Ya. Amusia, V. K. Ivanov, and V. A. Kharchenko, *J. Phys. B* **18**, L563 (1985).
57. S. Kucas, A. Momkauskaite, and R. Karazija, *Astroph. J.* **810**, 26 (2015).
58. A. Kucukonder and M. Erguven, *AIP Conf. Proc.* **2043**, 020021 (2018).
59. S. Santra, A. C. Mandal, D. Mitra et al., *Radiat. Phys. Chem.* **74**, 282 (2005).
60. I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev et al., *Phys. Rev. A* **85**, 032712 (2012).
61. P. Verma, P. H. Mokler, A. Bräuning-Demian et al., *Phys. Scr. T* **144**, 014032 (2011).
62. G. Lapicki, *ICPEAC Abstracts. WE-124*, Queensland (2017).
63. J. S. Briggs and J. Macek, *J. Phys. B* **5**, 579 (1972).
64. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, *Письма ЖЭТФ* **114**, 13 (2021).
65. W. E. Meyerhof and K. Taulbjerg, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **27**, 279 (1977).
66. W. N. Lennard and I. V. Mitchell, J. S. Forster, *Phys. Rev. A* **18**, 1949 (1978).
67. C. Foster, T. P. Hoogkamer, P. Woerlee, and F. W. Saris, *J. Phys. B* **9**, 1943 (1976).
68. А. Н. Зиновьев, С. Ю. Овчинников, Ю. С. Гордеев, *Письма ЖТФ* **7**, 139 (1981).
69. В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев, *Письма ЖТФ* **48**, 30 (2022).
70. С. Ю. Овчинников, Е. А. Соловьев, *Письма ЖЭТФ* **91**, 477 (1986).
71. M. Pieksma and S. Yu. Ovchinnikov, *J. Phys. B* **24**, 2699 (1991).
72. С. В. Авакян, Р. Н. Ильин, В. М. Лавров, Г. Н. Огурцов, *Сечения процессов ионизации и возбуждения*, ГОИ, СПб. (2000).
73. V. V. Afrosimov et al., *XI Int. Conf. on Phys. of Electronic and Atomic Collisions*, Kyoto (1979).
74. В. В. Афросимов и др., *ЖТФ* **41**, 134 (1972).
75. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, В. М. Лавров, *ЖЭТФ* **68**, 1715 (1975).
76. F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara, and R. Laubert, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 717 (1972).
77. P. H. Mokler, H. J. Stein, and P. Armbruster, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 827 (1972).
78. J. R. MacDonald, M. D. Brown, and T. Chiao, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 471 (1973).
79. G. Bissinger, and L. C. Feldman, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1 (1974).
80. B. Knaf and G. Presser, *Phys. Lett. A* **49**, 89 (1974).
81. F. W. Saris, *J. Phys. B* **17**, 1494 (1974).
82. W. E. Meyerhof, T. K. Saylor, and R. Anholt, *Phys. Rev. A* **12**, 2641 (1975).
83. V. M. Mikoushkin, G. N. Ogurtsov, and I. P. Flaks, *J. Phys. B* **16**, L405 (1983).
84. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., *Письма ЖЭТФ* **24**, 33 (1976).
85. В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, *ЖЭТФ* **84**, 454 (1983).
86. А. З. Девдариани, В. Н. Островский, Ю. Н. Себякин, *ЖЭТФ* **73**, 412 (1977).
87. V. K. Nikulin and N. A. Guschina, *J. Phys. B* **11**, 3553 (1978).

88. B. Fricke and W.-D. Sepp, J. Phys. B **14**, L549 (1981).
89. Л. М. Кишиневский, Е. С. Парилис, ЖЭТФ **55**, 1932 (1968).
90. L. M. Kishinevsky and B. G. Krakov, E. S. Parilis, Phys. Lett. A **85**, 141 (1981).
91. A. P. Shergin, R. Mann, and H. F. Beyer, Z. Phys. A **302**, 191 (1981).
92. В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев, ЖЭТФ **160**, 794 (2021).
93. W. Sidis, J. Phys. B **6**, 1188 (1973).
94. P. H. Woerlee, Yu. S. Gordeev, H. de Waard, and F. W. Saris, J. Phys. B **14**, 527 (1981).
95. A. P. Shergin, R. Stotzel, Z. Roller et al., Phys. Rev. A **34**, 4490 (1986).
96. В. Р. Асатрян, А. П. Шергин, Письма ЖЭТФ **44**, 454 (1986).
97. E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **54**, 893 (1981).
98. S. Yu. Ovchinnikov, G. N. Ogurtsov, J. H. Macek, and Yu. S. Gordeev, Phys. Rep. **389**, 169 (2004).
99. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, М. (2019).
100. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov, and J. H. Macek, Phys. Rev. A **74**, 042720 (2006).
101. S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A **84**, 032706 (2011).
102. S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, NIMB **241**, 78 (2005).
103. J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. **104**, 033201 (2010).
104. L. Ph. H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 083201 (2014).
105. G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan et al., Phys. Rev. A **53**, 2391 (1996).
106. А. Н. Зиновьев, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, *Abstr. XII ICPEAC*, Gatlinburg (1981).
107. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, Д. С. Мелузова, А. П. Шергин, Письма ЖЭТФ **108**, 666 (2018).
108. A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, NIMB **467**, 140 (2020).
109. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, Поверхность **12**, 64 (2020).
110. P. Sigmund, NIMB **406**, 391 (2017).
111. C. C. Montanari and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **96**, 012707 (2017).
112. О. Б. Фирсов, ЖЭТФ **36**, 1517 (1959).
113. J. F. Ziegler and J. P. Biersack, SRIM. <http://www.srim.org>.
114. F. Xu, G. Manico, F. Ascione et al., Phys. Rev. A **57**, 1096 (1998).
115. H. Paul, Stopping Power for Light Ions. <http://www.exphys.uni-linz.ac.at/stopping>.
116. P. Sigmund and A. Schinner, NIMB **195**, 64 (2002).
117. P. M. Echenique, F. Flores, and R. H. Ritchie, Sol. Stat. Phys. **43**, 229 (1990).

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