

ISSN 0370-274X

Том 118, Выпуск 7–8

Октябрь 2023



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



2023 г. Том 118 вып. 7, стр. 471 – 548

2023 г. Том 118 вып. 8, стр. 549 – 626

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 118

Выпуск 7

10 октября 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора
Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

Интернет-версия английского издания
<http://www.springerlink.com/content/1090-6487>

Возможный метод поиска майорановских нейтрино на будущих лептонных коллайдерах

Е. С. Антонов⁺¹⁾, А. Г. Друцкой⁺¹⁾, М. Н. Дубинин^{*1)}

⁺Физический институт РАН им. П. Н. Лебедева, 119991 Москва, Россия

^{*}Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 августа 2023 г.

После переработки 22 августа 2023 г.

Принята к публикации 22 августа 2023 г.

Исследуется процесс $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^\pm\ell^\mp$, где N – тяжелое майорановское нейтрино, а $\ell = e, \mu$. Для данного процесса ожидается большое сечение при высоких энергиях пучков в системе центра масс, достижимых на будущих лептон-лептонных коллайдерах. Монте-Карло моделирование исследуемого процесса было выполнено в рамках модели seesaw type-I, в которой лептонный сектор стандартной модели расширяется майорановскими нейтрино (или тяжелыми нейтральными лептонами, HNL). Возможность поиска прямого рождения HNL недавно была изучена для канала $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu_\ell$ с последующим распадом $N \rightarrow W^\pm\ell^\mp$. В данной работе мы исследуем альтернативный процесс $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^\pm\ell^\mp \rightarrow W^\pm W^\pm\ell^\mp\ell^\mp$ с нарушением лептонного числа на две единицы. Аналогичные процессы возможны при столкновении частиц одного знака заряда, $e^-e^- \rightarrow NW^-e^- \rightarrow W^-W^-e^+e^-$ или $\mu^+\mu^+ \rightarrow NW^+\mu^+ \rightarrow W^+W^+\mu^+\mu^-$. Рассматриваемые сечения усиливаются за счет обмена мягкими фотонами в t -канале. В работе вычислены сечения процессов для сигнала и изучены потенциальные фоны стандартной модели, возникающие в результате столкновений e^+e^- пучков при энергии в системе центра масс 1 ТэВ и $\mu^+\mu^-$ пучков при энергиях 3 и 10 ТэВ. Вследствие диаграмм с мягкими t -канальными фотонами первичные лептоны вылетают в направлении, близком к начальному пучку частиц соответствующего знака. Эти лептоны будут потеряны в вакуумной трубе коллайдера или плохо измерены передними детекторами. Тем не менее сигнальные события могут быть отделены от фоновых благодаря оставшимся детектируемым частицам $WW\ell$. Установлены ожидаемые ограничения сверху для параметров смешивания $|V_{\ell N}|^2$ в зависимости от массы HNL.

DOI: 10.31857/S1234567823190011, EDN: xvhome

I. Введение. Нейтрино стандартной модели (SM) могут быть майорановскими фермионами, при этом механизм образования их масс связан с нарушением глобальной инвариантности $U(1)_{B-L}$ лагранжиана SM. В результате становятся возможными очень редкие процессы взаимодействия с нарушением лептонного числа (LNV-процессы). Очень малые массы стандартных (или активных) нейтрино объясняются в рамках расширения лептонного сектора SM введением майорановских нейтрино (или тяжелых нейтральных лептонов, HNL). В процессах с участием HNL возможно экспериментальное наблюдение эффектов нарушения лептонного числа.

Текущие экспериментальные значения верхних пределов параметров смешивания HNL $|V_{lN}|$, $l = e, \mu, \tau$ в зависимости от массы HNL представлены

в обзоре [1]. Интервал масс от 0.1 ГэВ до нескольких ГэВ изучается в экспериментах с выведенным пучком с восстановлением недостающей энергии и экспериментами с далеко отстоящими вторичными вершинами. Интервал масс до масштаба ТэВ – это диапазон, изучаемый в экспериментах на коллайдерах. На LEP были получены строгие верхние пределы для масс HNL вплоть до массы Z -бозона [2], однако пределы для масс HNL выше 100 ГэВ довольно слабые. Верхний предел для суммы $|\sum_i V_{eN_i}^2/M(N_i)| \leq 1.8 \times 10^{-8} \text{ ГэВ}^{-1}$ был получен в рамках модели seesaw type-I из экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада ($0\nu\beta\beta$) [3]. Однако это ограничение можно обойти при определенных условиях, в частности включением трех поколений тяжелых HNL при определенной комбинации фаз CP в матрице PMNS [4]. Последние экспериментальные верхние пределы параметров смешивания для масс HNL, превышающих 100 ГэВ, были получены из данных LHC run II [5–7], более строгие ограни-

¹⁾Antonov@lebedev.ru; Drutskoy@lebedev.ru; Dubinin@theory.sinp.msu.ru

чения ожидаются после будущего увеличения светимости LHC [2, 8–10]. Однако значительного улучшения ограничений сверху можно будет достичь на будущих лептонных коллайдерах высоких энергий [11].

Моделирование рождения HNL в коллайдерных экспериментах продемонстрировало реалистичные возможности поиска сигнальных процессов на e^+e^- , e^-e^- , $\mu^+\mu^-$ и $\mu^+\mu^+$ коллайдерах при энергиях порядка нескольких ТэВ. После расчета процесса $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}e\nu$ на партонном уровне на LEP2 [12], выполненного для полного набора $2 \rightarrow 4$ диаграмм с помощью пакета программ CompHEP [13, 14], был проведен ряд детальных исследований по отделению сигнала от фона SM, включая моделирование детектора. В работе [11] проведено исследование канала $e^+e^- \rightarrow N\nu \rightarrow q\bar{q}l\nu$ при энергиях ILC и CLIC, выполненное с помощью программ FeynRules [15], Whizard [16] и Delphes [17]. Теоретико-полевая модель заложена в пакете FeynRules, генерация событий выполняется в Whizard. Моделирование детектора и реконструкция событий выполняются в программе Delphes, тем самым обеспечивая реалистичное описание всех объектов в конечном состоянии. Возможность поиска HNL в процессе $\mu^+\mu^- \rightarrow N\nu \rightarrow q\bar{q}l\nu$ при энергиях в ТэВ-ной области изучалась в [18] и [19] с использованием программ FeynRules, Whizard и Delphes, а в [20] – программ FeynRules, Madgraph5 [21] и Delphes. В исследованиях процессов $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu \rightarrow q\bar{q}l\nu$ верхние пределы параметра смешивания получены на уровне порядка $|V_{\ell N}|^2 \sim 10^{-5} - 10^{-7}$ при интегральных светимостях порядка нескольких аб⁻¹ и энергии столкновения пучков в диапазоне (1–10) ТэВ. Хотя фон под сигналом достаточно велик, хорошее отделение сигнала было достигнуто за счет использования ряда дискриминирующих переменных, введенных для описания конечного состояния. Рождение HNL в процессе перерасеяния векторных бозонов изучалось в [22] для мюонных коллайдеров при высоких энергиях. Возможность поиска HNL в e^-p -столкновениях с протонами с энергией порядка нескольких ТэВ и электронами с энергией 60 ГэВ обсуждалась в [23].

В данной работе изучается рождение тяжелых майорановских нейтрино в процессах $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$ и $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$ с помощью программ LanHEP [24], CompHEP, Pythia6 [25] и Delphes. Теоретико-полевая модель определена в пакете LanHEP, генерация событий выполняется с помощью CompHEP, распады HNL и W -бозонов, а также адронизация, выполняются с помощью Pythia, а моделирование детектора выполняется с помощью Delphes. Образовавшиеся майорановские

нейтрино распадаются в каналах $N \rightarrow W^+e^-$ и $N \rightarrow W^+\mu^-$, что приводит к нарушению лептонного числа на две единицы. Эти процессы разрешены только в случае майорановских нейтрино и имеют четкую экспериментальную сигнатуру. В статье по умолчанию предполагаются зарядово-сопряженные процессы. Похожие процессы $e^-e^- \rightarrow NW^-e^-$ и $\mu^+\mu^+ \rightarrow NW^+\mu^+$ возможны при столкновениях пучков одинакового знака.

Процесс $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$ изучался в [26] при энергиях в центре масс (CM) 350 и 500 ГэВ с использованием пакетов FeynRules и Madgraph5. Однако в этом исследовании предполагалась реконструкция всех частиц конечного состояния, что приводило к очень небольшому количеству ожидаемых сигнальных событий.

Следует отметить, что прямое рождение HNL в результате лептон-лептонных столкновений обеспечивает высокую чувствительность к параметру смешивания $|V_{\ell N}|^2$, поскольку процесс содержит только одну вершину $NW\ell$. Процесс $\mu^+\mu^+ \rightarrow W^+W^+$ с двумя такими вершинами позволяет получить более слабые значения верхних пределов, однако имеет чувствительность к массам HNL, превышающим энергию столкновений в CM [4, 27, 28].

II. Модель seesaw type-I. В рамках известного механизма seesaw type-I массы стандартных (активных) нейтрино генерируются при помощи лагранжиана [29]

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{SM} + i\bar{\nu}_R \gamma^\mu \partial_\mu \nu_R - \left(F \bar{L}_l \tilde{H} \nu_R + \frac{1}{2} M_M \bar{\nu}^c_R \nu_R + \text{h.c.} \right), \quad (1)$$

где $L_l = (\nu_l, l)_L^T$ – левый дублет лептонов, ν_R – калибровочные состояния HNL, $(\nu_R)^c \equiv C\bar{\nu}_R^T$ ($C = i\gamma_2\gamma_0$), H – хиггсовский дублет ($\tilde{H} = i\tau_2 H^*$, τ_2 – матрица Паули), F – матрица Юкавы 3×3 и M_M – майорановская массовая матрица для трех поколений, $M_M^T = M_M$. После спонтанного нарушения симметрии матрица Юкавы $M_D = Fv/\sqrt{2}$ ($v = 246$ ГэВ) и майорановская матрица M_M образуют полную массовую матрицу 6×6 расширенного лептонного сектора

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (\bar{\nu}_L \bar{\nu}^c_R) \mathcal{M} \begin{pmatrix} \nu_L^c \\ \nu_R \end{pmatrix} + \text{h.c.} = \\ & = \frac{1}{2} (\bar{\nu}_L \bar{\nu}^c_R) \begin{pmatrix} 0 & M_D \\ M_D^T & M_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_L^c \\ \nu_R \end{pmatrix} + \text{h.c.}, \quad (2) \end{aligned}$$

где калибровочные состояния $(\nu_L)_\alpha, (\nu_R)_I$ и массовые состояния ν_k, N_I ($\alpha = e, \mu, \tau$, $k, I = 1, 2, 3$) связаны следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \nu_L \\ \nu_R^c \end{pmatrix} = U P_L \begin{pmatrix} \nu \\ N \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U} = \mathcal{W} \cdot \text{diag}(U_\nu, U_N^*). \quad (3)$$

$P_L = (1 - \gamma_5)/2$ – левокиральный проектор, U_ν, U_N – унитарные матрицы 3×3 . Блочнo-диагональная форма полной массовой матрицы (2) имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^\dagger \mathcal{M} \mathcal{U}^* &= \begin{pmatrix} U_\nu^\dagger & 0 \\ 0 & U_N^T \end{pmatrix} \mathcal{W}^\dagger \mathcal{M} \mathcal{W}^* \begin{pmatrix} U_\nu^* & 0 \\ 0 & U_N \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} U_\nu^\dagger m_\nu U_\nu^* & 0 \\ 0 & U_N^T M_N U_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{m} & 0 \\ 0 & \hat{M} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\hat{m}$ и $\hat{M}$ – диагональные массовые матрицы для активных нейтрино и HNL, $\mathcal{W}^\dagger \mathcal{M} \mathcal{W} = \text{diag}(m_\nu, M_N)$, $\mathcal{M}$ определяются ур.(2). В рамках последующей процедуры диагонализации массового члена [30, 31] (так называемая диагонализация Касаса–Ибарры) унитарная матрица $\mathcal{W}$ представляется в виде экспоненты антиэрмитовой матрицы

$$\mathcal{W} = \exp \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

и раскладывается в ряд до членов второго порядка по θ . В результате связь массовых и калибровочных состояний нейтрино можно записать в виде

$$\begin{aligned} \nu_L &\simeq \left(1 - \frac{1}{2}\theta\theta^\dagger\right) U_\nu P_L \nu + \theta U_N^* P_L N, \\ \nu_R^c &\simeq -\theta^\dagger U_\nu P_L \nu + \left(1 - \frac{1}{2}\theta^\dagger \theta\right) U_N^* P_L N. \end{aligned} \quad (6)$$

Первый член (6) соответствует известному феноменологическому соотношению $\nu_{L\alpha} = \sum_\alpha (U_{\text{PMNS}})_{\alpha j} P_L \nu_j$, определяющему матрицу смешивания Понтекорво–Маки–Накагава–Саката (PMNS) в секторе активных нейтрино [32, 33]. Отклонение матрицы PMNS от унитарности определяется членом $-\frac{1}{2}\theta\theta^\dagger$. Члены лагранжиана для взаимодействия массовых состояний нейтрино и массовых состояний HNL с $W^\pm, Z$ бозонами имеют формы

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{NC}^\nu &= -\frac{g}{2c_W} \gamma^\mu \bar{\nu}_L U_{\text{PMNS}}^\dagger U_{\text{PMNS}} \nu_L Z_\mu, \\ \mathcal{L}_{CC}^\nu &= -\frac{g}{\sqrt{2}} \bar{l}_L \gamma^\mu U_{\text{PMNS}} \nu_L W_\mu^- + \text{h.c.}, \\ \mathcal{L}_{NC}^N &= -\frac{g}{2c_W} \bar{N}_L \gamma^\mu U_N^T \theta^\dagger \theta U_N^* N_L Z_\mu - \\ &\quad - \left[\frac{g}{2c_W} \bar{\nu}_L \gamma^\mu U_\nu^\dagger \theta U_N^* N_L Z_\mu + \text{h.c.} \right], \\ \mathcal{L}_{CC}^N &= -\frac{g}{\sqrt{2}} \bar{l}_L \gamma^\mu \theta U_N^* N_L W_\mu^- + \text{h.c.}, \end{aligned} \quad (7)$$

откуда видно, что смешивание HNL в приближении $\mathcal{W} \sim \mathcal{O}(\theta^2)$ определяется матрицей $\Theta \equiv \theta U_N^*$. Массовая матрица активных нейтрино задается в рамках рассматриваемого приближения $\mathcal{O}(\theta^2)$ известным уравнением seesaw type I

$$m_\nu \simeq -M_D \theta^T \simeq -M_D M_M^{-1} M_D^T \quad (8)$$

с неоднозначным определением M_D при помощи U_{PMNS} и матрицы U_N сектора HNL

$$M_D = i U_{\text{PMNS}} \sqrt{\hat{m}} \Omega \sqrt{\hat{M}} U_N^\dagger, \quad (9)$$

где Ω – произвольная ортогональная матрица, $\Omega \Omega^T = I$. Компоненты матрицы смешивания имеют вид

$$\Theta_{\alpha I} = i \frac{\sum_k \sqrt{m_k} (U_\nu)_{\alpha k} \Omega_{kI}}{\sqrt{M_I}}, \quad (10)$$

где $\alpha = e, \mu, \tau$ и $I = 1, 2, 3$ – номер поколения HNL. Смешивание для первого поколения HNL, который обычно рассматривается на роль кандидата частицы темной материи, определяется первым столбцом матрицы Ω .

В наиболее простом случае “минимального параметрического смешивания” $\Omega = I$ (единичная матрица) получаем матрицу смешивания для нормальной массовой иерархии активных нейтрино (далее – NH)

$$\Theta_{\text{min}}^{\text{NH}} = \begin{pmatrix} i U_{e1} \sqrt{\frac{m_1}{M_1}} & i U_{e2} \sqrt{\frac{m_2}{M_2}} & i U_{e3} \sqrt{\frac{m_3}{M_3}} \\ i U_{\mu 1} \sqrt{\frac{m_1}{M_1}} & i U_{\mu 2} \sqrt{\frac{m_2}{M_2}} & i U_{\mu 3} \sqrt{\frac{m_3}{M_3}} \\ i U_{\tau 1} \sqrt{\frac{m_1}{M_1}} & i U_{\tau 2} \sqrt{\frac{m_2}{M_2}} & i U_{\tau 3} \sqrt{\frac{m_3}{M_3}} \end{pmatrix}.$$

Для обратной массовой иерархии (IH) используется антидиагональная Ω . Используя токи для HNL ур. (7), заключаем, что их сечения рождения в низшем порядке содержат фактор $|\Theta|^2$ и сильно подавлены отношением масс m/M активных нейтрино и HNL. В литературе последнего времени на почти безальтернативной основе используется интересный феноменологически вариант смешивания

$$\begin{aligned} \Omega^{\text{NH}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega) & -\sin(\omega) \\ 0 & \xi \sin(\omega) & \xi \cos(\omega) \end{pmatrix}, \\ \text{или } \Omega^{\text{IH}} &= \begin{pmatrix} 0 & \cos(\omega) & -\sin(\omega) \\ 0 & \xi \sin(\omega) & \xi \cos(\omega) \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

Усиление сечений возникает при комплексных параметрах ω , которые дают факторы $X_\omega = \exp(\text{Im}(\omega))$ в матрице Θ .

Анализ смешивания активных и стерильных нейтрино в [34] продемонстрировал, что феноменологически согласованная иерархия смешиваний Θ_{eI} , $\Theta_{\mu I}$ и $\Theta_{\tau I}$ с подавлением Θ_{eI} относительно других элементов матрицы смешивания может быть достигнута в широком интервале X_ω независимо от значений масс HNL. Экспериментальные верхние границы для $\Theta_{\alpha I}$, полученные из кратчайших возможных для экспериментальной регистрации времен жизни $N_{2,3}$ при распадах $\pi^\pm$ и $K^\pm$, преобразованные в верхнюю границу для X_ω , приводят к $\text{Im}(\omega) \sim 4$ при массе HNL порядка 10^2 МэВ для времени жизни порядка 1 с и $\text{Im}(\omega) \sim 7$ для времени жизни порядка 0.01 с. Значения параметра ω , превышающие 7, могут привести к большим параметрам смешивания, не согласующимся с электрослабыми данными высокой точности. Недавний пересмотр в свете современных данных для поиска HNL в диапазоне масс, меньшем массы K мезона, был проведен в [35] для случая двух поколений HNL. Модельная зависимость Θ -смешивания приводит к довольно нетривиальному набору последствий для наблюдаемых величин. По этой причине исследования на ускорителях проводятся в рамках так называемого “независимого от модели феноменологического подхода” [36] или, другими словами, “феноменологической модели seesaw type-I” [37]. В модельно-независимом феноменологическом подходе предполагается, что в эксперименте доступен только один HNL, в то время как другие HNL являются достаточно тяжелыми и, отщепляясь, не влияют на анализ. В этом подходе есть только два независимых параметра: масса HNL и параметр связи Юкавы, определяющий взаимодействие HNL с активным нейтрино данного аромата, предполагая, что смешивание с другими ароматами равно нулю. В феноменологическую модель seesaw type-I добавлен дополнительный параметр, отличающий случай нейтрино Дирака от случая нейтрино Майораны, который позволяет различать наблюдаемые, специфичные для теоретико-полевой модели. Такие упрощения полезны для вывода общих границ параметра смешивания, выходящих за рамки каких-либо аспектов построения конкретной модели, но нуждаются в соответствующем переводе, если нужно выйти за рамки случая одного поколения и рассмотреть четко определенное смешивание.

В последующем анализе, основанном на диагонализации Касаса–Ибарры, коэффициент смешивания, включающий $\sqrt{m/M}$, увеличивается путем принятия комплексного параметра $\text{Im}(\omega) = 3$, затем вычисления $\Theta_{\alpha I}$. Этот подход отличается от конкретных сценариев смешивания в так называемом псевдо-

дираковском пределе, где используется дополнительная симметрия для согласования очень малых активных масс нейтрино с их большими смешиваниями, необходимая для получения наблюдаемых сигналов HNL на электрослабом масштабе. Явные выражения для $\Theta_{\alpha I}$ как функции от $\text{Im}(\omega)$ приведены в [34].

III. Экспериментальная часть.

А. Монте-Карло моделирование и реконструкция событий. Сигнальные процессы $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^\pm\ell^\mp$, где $\ell = e, \mu$, моделируются с помощью пакета программ ComrHEP [13], в который встроена seesaw type-I модель. Как упоминалось выше, для простоты в расчеты включено только одно майорановское нейтрино, которое в дальнейшем обозначается как N . Предполагается, что два других HNL дают малый вклад. В расчеты включены матричные элементы для всех возможных диаграмм сигнала и фона на партонном уровне, которые разрешены для изучаемого процесса. Сигнальному процессу соответствует набор 30 диаграмм, включенных в генераторе событий ComrHEP. Две из них, диаграммы с t -канальными векторными бозонами, показаны на рис. 1.

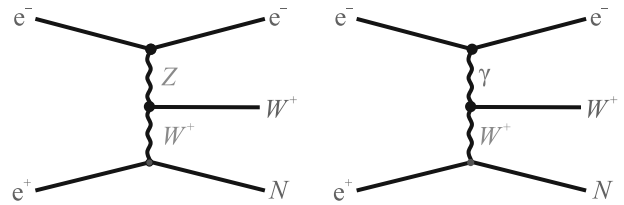


Рис. 1. (Цветной онлайн) Примеры диаграмм, которые описывают процесс $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$

Пакет ComrHEP вычисляет сечения изучаемых процессов и создает наборы данных Монте-Карло (МК) событий без веса. Проведена генерация событий для процесса $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$ при энергии СМ 1 ТэВ и процесса $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$ при энергиях СМ 3 и 10 ТэВ. Предполагается, что пучки неполяризованы. Массы HNL варьируются в диапазоне от 100 ГэВ до энергии СМ. Предполагается, что ширина HNL увеличивается с ростом массы HNL, как было получено в [11]. Изменение ширины HNL в пределах 20 % приводит к изменению сечения менее чем 1 %.

Последующие распады $N \rightarrow W^\pm\ell^\mp$ и $W^\pm \rightarrow q\bar{q}$ моделируются в Pythia6. Используются только адронные распады W -бозонов. Мы смоделировали в Pythia6 распределение по углу θ_ℓ^* лептона в системе покоя HNL относительно направления HNL в соответствии с формулой $f(\theta_\ell^*) = (1 - \cos(\theta_\ell^*))/2$. Эффекты излучения пучков в начальном состоянии (ISR)

включены на уровне Pythia6. Процесс адронизации кварков также моделируется в Pythia6. Наборы данных для фонов SM получены с помощью генератора Whizard 2, в который включен пакет программ Pythia6. При генерации фона используются те же пучки и энергии CM, что и для сигнала. Полученные наборы данных для сигнальных и фоновых событий обрабатываются с помощью программы Delphes [17], которая обеспечивает быстрое и упрощенное моделирование детекторов и реконструкцию событий. В Delphes используется модель детектора ILC для реконструкции процесса $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$ при 1 ТэВ и модель детектора MuC для реконструкции процесса $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$ при 3 и 10 ТэВ. Струи реконструируются с помощью алгоритма Valencia с параметрами по умолчанию. Алгоритм реконструкции струй в Delphes принудительно собирает ровно четыре струи. Полученные наборы выходных данных содержат информацию о 4-импульсах восстановленных струй и изолированных лептонов. Наборы данных для сигнальных и фоновых событий, полученные из Delphes, анализируются с помощью пакета ROOT.

В. Сечения. Сечения процессов $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^+\ell^-$, вычисленные с помощью программы CompHEP, показаны на рис. 2. Параметр смешивания зафиксирован в значение $|V_{\ell N}|^2 = 0.0003$, для сравнения результатов с [11], где использовалось это значение. Сечения процессов $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu_\ell$, вычисленные с помощью CompHEP, также показаны на рис. 2. Для обоих процессов предполагаются одинаковые пучки, энергии CM и параметры смешивания. Унитарное сокращение полюса второго порядка для t -канала, см. рис. 1 (правая диаграмма), проверяется непосредственно с помощью распределения $d\sigma/d(\ln t)$ [38]. Значения сечений процесса $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu_\ell$, полученные с помощью CompHEP, хорошо совпадают со значениями сечений, рассчитанными в [11] с использованием генератора Whizard 2.

Как видно из рис. 2, плато в сечении процесса $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^+\ell^\mp$ растет с ростом энергии CM в отличие от процесса $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu_\ell$. При высоких энергиях CM процесс $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^+\ell^\mp$ имеет большие сечения и может быть использован для получения строгих верхних пределов на параметры смешивания. Дополнительными преимуществами этого процесса являются высокая эффективность реконструкции сигнала и хорошее разделение сигнала и фона.

С. Отборы. Процесс $\ell^+\ell^- \rightarrow W^+W^+\ell^-\ell^-$ включает два лептона одинакового знака и четыре струи в конечном состоянии. Хотя в этом конечном состоянии нет фонов SM, эффективность полной реконструкции события ниже процентного уровня. Один

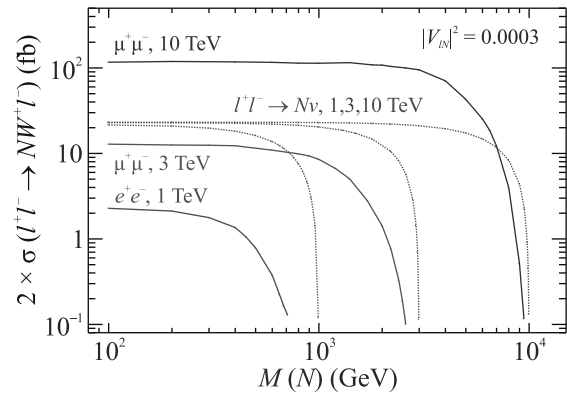


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечения, построенные в зависимости от массы HNL, показаны для процесса $e^+e^- \rightarrow NW^+e^-$ при 1 ТэВ (фиолетовая линия) и процесса $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$ при 3 ТэВ (красная линия) и 10 ТэВ (синяя линия). Фактор 2 отражает два зарядово-сопряженных конечных состояния. Для сравнения также показаны сечения процессов $\ell^+\ell^- \rightarrow N\nu_\ell$ для тех же параметров смешивания, частиц пучка и энергий CM (пунктирные коричневые линии)

из лептонов конечного состояния преимущественно излучается близко к направлению пучка и не регистрируется в детекторе или плохо измеряется передними калориметрами. Поэтому не рассматривается сигнатура, в которой должны быть реконструированы все частицы.

Рассматривалось конечное состояние с четырьмя струями и одним лептоном. Начальные отборы были сделаны на энергию и псевдобыстроту струй и лептона:

$$E(j) > 10 \text{ ГэВ}; \quad E(\ell) > 10 \text{ ГэВ}; \\ |\eta(j)| < 2.5; \quad |\eta(\ell)| < 2.5. \quad (12)$$

Струи рождаются при распаде W -бозона, соответственно мы комбинируем четыре струи в два бозона. Среди возможных комбинаций в качестве кандидатов в W -бозоны были выбраны две пары струй с инвариантными массами, наиболее близкими к номинальной массе W -бозона. Если W -бозон имеет большую энергию, образующиеся струи могут частично перекрываться. В этом случае параметры отдельных струй могут быть неточными, однако соответствующая сумма этих двух струй с достаточной точностью воспроизводит массу и импульс W -бозона.

Для разделения сигнальных и фоновых событий мы используем следующие переменные:

- $M_{\text{miss}}(4j \ell^-)$ – недостающая масса к сумме четырех струй и реконструированного лептона;

- b) $M(jj)$ – массы пар струй – кандидатов в W -бозоны;
- c) $\cos(W_1 \vee W_2)$ – косинус угла между двумя кандидатами в W -бозоны;
- d) $\cos(\ell^- \vee \ell_{\text{beam}}^-)$ – косинус угла между направлениями реконструированного лептона и пучкового лептона того же знака;
- e) $\cos(P_{\text{miss}}(4j \ell^-) \vee \ell_{\text{beam}}^-)$ – косинус угла между недостающим импульсом (к четырем струям и изолированному лептону) и лептоном пучка того же знака;
- f) $M_\Delta(W\ell^-)$ – инвариантные массы W -бозона и реконструированного лептона (две комбинации).

Отбор по переменной $M_{\text{miss}}(4j \ell^-)$ используется для подавления фонов с двумя и более ненаблюдаемыми частицами, поскольку такие фоны должны иметь большую недостающую массу. Масса пар струй, отобранных как кандидаты в W -бозоны, должна лежать в диапазоне $50 < M(jj) < 120$ ГэВ. Фоны, в которых только один родившийся W , или Z -бозон распадается на две струи, могут имитировать четырехструйную конфигурацию. Для такого фона угол между кандидатами в W -бозоны должен быть небольшим, и для подавления этого фона применяется ограничение по переменной $\cos(W_1 \vee W_2) < 0.8$. У фонов, возникающих в результате процессов слияния векторных бозонов, должен быть малый угол между направлениями лептонов и соответствующих пучков. Ограничение $\cos(\ell^- \vee \ell_{\text{beam}}^-) < 0.7$ используется для существенного подавления этих фонов. Это же ограничение подавляет фоны, в которых лептон рождается при распаде W -бозона. Как объяснялось выше, ненаблюдаемый лептон преимущественно излучается под малым углом относительно направления соответствующего пучка. Знак пучка определяется в соответствии со знаком восстановленного лептона. Поэтому импульс системы, состоящей из четырех струй и лептона, можно использовать для оценки направления потерянного лептона. Переменная $\cos(P_{\text{miss}} \vee \ell_{\text{beam}}^-)$ имеет максимум распределения в области 1 для сигнальных событий, за исключением событий с массой HNL, близкой к E_{cms} . Напротив, фоны, возникающие в результате слияния векторных бозонов, достигают максимума при значении -1 , тогда как другие фоны имеют плоское распределение. Поэтому ограничение $\cos(P_{\text{miss}} \vee \ell_{\text{beam}}^-) > 0.9$ применяется для всех значений массы HNL, за исключением области больших масс, где распределение для сигнала становится плоским. Все примененные огра-

ничения указаны в табл. 1. После всех отборов, в распределениях инвариантной массы W -бозона и восстановленного лептона $M_\Delta(W\ell^-)$ необходимо провести поиск пика, соответствующего рождению HNL. Разность масс $M_\Delta(W\ell^-) = M(jj\ell^-) - M(jj) + 80.377$ используется вместо $M(jj\ell^-)$ для улучшения разрешения сигнала, особенно в области малых масс HNL меньше 500 ГэВ.

Таблица 1. Ограничения на переменные, применяемые при разных энергиях СМ. В последнем столбце указаны ограничения для области высоких масс HNL $M(N) > 0.85 E_{\text{cms}}$, где не используется ограничение на $\cos(P_{\text{miss}} \vee \ell_{\text{beam}}^-)$

Энергия СМ, Пучки	1 ТэВ e^+e^-	3 ТэВ $\mu^+\mu^-$	10 ТэВ $\mu^+\mu^-$	$M(N) >$ $0.8 E_{\text{cms}}$
M_{miss} , ГэВ	< 350	< 800	< 3000	та же
$M(jj)$, ГэВ	50–120	50–120	50–120	50–120
$\cos(W_1 \vee W_2)$	< 0.8	< 0.8	< 0.8	< 0.8
$\cos(\ell^- \vee \ell_{\text{beam}}^-)$	< 0.7	< 0.7	< 0.7	< 0.7
$\cos(P_{\text{miss}} \vee \ell_{\text{beam}}^-)$	> 0.9	> 0.9	> 0.9	–

Д. Фоны. Для упрощения в этом разделе используется описание метода для электронного канала, тогда как точно такой же анализ проводился и для каналов с мюонным пучком. Исследуемые фоны должны иметь как минимум один идентифицированный изолированный лептон. Изолированные лептоны могут рождаться в результате распадов W или Z -бозонов или в процессах слияния векторных бозонов. Фоны с ошибочной идентификацией лептона не изучались, ожидается, что эти фоны дают пренебрежимо малый вклад. Необходимым условием является реконструкция всех четырех струй, однако есть фоны, в которых две струи разделены и имитируют четыре струи.

Предполагается, что интегральная светимость равна 1 аб^{-1} для e^+e^- -столкновений при 1 ТэВ и для $\mu^+\mu^-$ -столкновений при 3 ТэВ. Для столкновений $\mu^+\mu^-$ при энергии 10 ТэВ предполагается интегральная светимость 10 аб^{-1} . С помощью генератора Whizard 2 оцениваются сечения для всех потенциально опасных фонов и рассчитывается приблизительное количество событий, которые, как ожидается, дают вклад в распределение $M_\Delta(W\ell^-)$. Если предполагаемое количество событий не слишком мало, генерируются наборы данных для получения более точных оценок. На уровне генерации фонов ограничение на псевдобыстроту $|\eta(\ell^-)| < 2.6$ применяется для отрицательно заряженных лептонов, образующихся в процессах слияния векторных бозонов. Проведена генерация событий для шести потенциально опасных фоновых каналов:

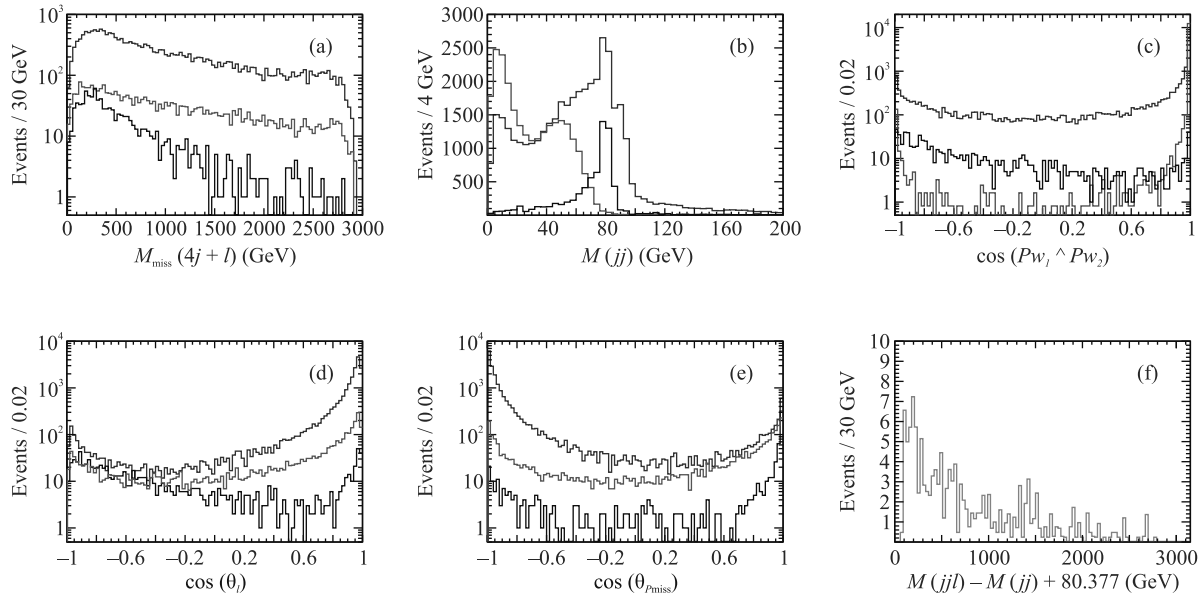


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределения для переменных: (a) – $M_{\text{miss}}(4j \ell^-)$; (b) – $M(jj)$; (c) – $\cos(W_1 \vee W_2)$; (d) – $\cos(\ell^- \vee \ell_{\text{beam}}^-)$; (e) – $\cos(P_{\text{miss}}(4j \ell^-) \vee \ell_{\text{beam}}^-)$ и (f) – $M_{\Delta}(W \ell^-)$, показанные для $\mu^+\mu^-$ -столкновений при энергии СМ 3 ТэВ. Гистограммы черного цвета описывают сигнальный процесс $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$ с $M(N) = 600$ ГэВ. Сигнал, показанный на рисунке (b), умножен на коэффициент 4. Цветные гистограммы описывают фоновые распределения для процессов $\mu^+\mu^- \rightarrow W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})\mu^-\nu_\mu$ (синие гистограммы), $\mu^+\mu^- \rightarrow W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})W^-(\mu^-\nu_\mu)$ (красные гистограммы) и $\mu^+\mu^-$ на $W^+(q\bar{q})W^-(\mu^-\nu_\mu)$ (фиолетовые гистограммы). Распределения получены после начальных отборов, но до основных отборов. Распределения для фонов нормированы на сечения, распределения для сигналов нормированы на 1000 событий. Зеленая гистограмма на рисунке (f) показывает сумму всех фоновых распределений при энергии 3 ТэВ после всех отборов

- a) $e^+e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})e^-\nu_e$;
- b) $e^+e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(e^-\nu_e)$;
- c) $e^+e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})e^-\nu_e$;
- d) $e^+e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})e^+e^-$;
- e) $e^+e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})W^-(e^-\nu_e)$;
- f) $\gamma^B e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})e^-$.

Фотоны, образующиеся в процессе излучения пучков (*beamstrahlung*), обозначаются как γ^B . На рисунке 3 показаны распределения введенных выше переменных для различных фонов при $\mu^+\mu^-$ -столкновениях с энергией 3 ТэВ. Соответствующие распределения при энергиях 1 и 10 ТэВ имеют схожую форму.

Как видно из рис. 3с, фоны только с одним W -бозоном сильно подавляются ограничением на $\cos(W_1 \vee W_2) < 0.8$. Фоны $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}e^-\nu_e$ с массой $M(q\bar{q}) > 120$ ГэВ, которые не происходят из распадов W -бозонов, имеют сечения в несколько фб еще до применения ограничений, что в результате дает вклад порядка 1 события или меньше. Сечение процесса $e^+e^- \rightarrow Z(jj)Z(jj)e^+e^-$ составляет около (1–3) фб при изученных энергиях СМ и вклад

от данного процесса меньше двух событий. Фоны $\gamma^B \mu^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})\mu^-$ дают очень небольшой вклад из-за относительно большой массы мюона и кольцевых пучков. Фоны от $\gamma\gamma$ -столкновений подавляются ограничениями на массу M_{miss} . Фон от процесса $e^+e^- \rightarrow t\bar{t} \rightarrow W^+W^-b\bar{b}$ сильно подавлен ограничением $M(jj) < 120$ ГэВ.

Значения сечений и чисел событий после применения всех ограничений для фоновых каналов, полученные из сгенерированных наборов данных в Whizard, приведены в табл. 2. После всех отборов получены несущественные вклады для фонов а) и б), составляющие всего несколько событий. Таким образом, фоновыми каналами, содержащими только один векторный бозон, можно пренебречь. Сечение фона $\gamma e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})e^-$ зависит от параметров пучка и оценивается с большой неопределенностью. Однако количество событий в этом канале невелико и этим вкладом также можно пренебречь. Хотя факторы подавления фоновых каналов с), d), e) относительно небольшие, сечения этих фонов относительно невелики. Соответственно, распределение $M_{\Delta}(W \ell^-)$, содержащее все фоны, показывает относительно небольшое количество событий

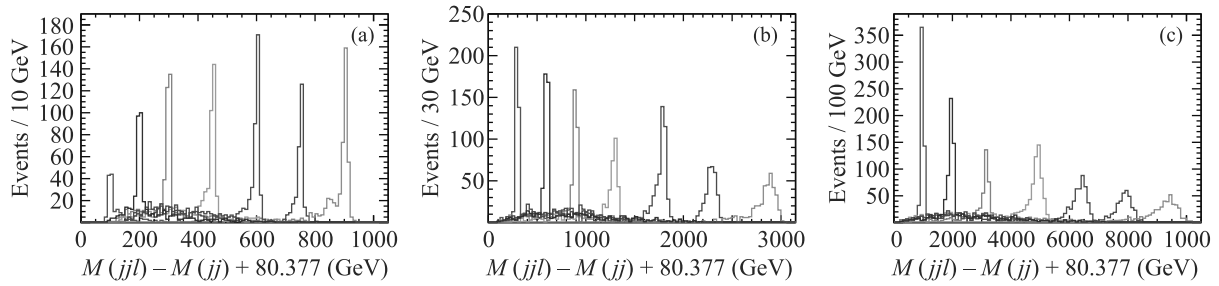


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределения по массе по переменной $M_{\Delta}(W\ell^-)$ показаны для: (a) – столкновений e^+e^- при энергии 1 ТэВ; (b) – столкновений $\mu^+\mu^-$ при 3 ТэВ и (c) – $\mu^+\mu^-$ -столкновений при 10 ТэВ. Сигналы для разных масс HNL показаны разными цветами. Включены две комбинации W -бозона и лептона, за исключением HNL с наибольшей массой, где берется только комбинация с большим значением импульса W . Значения смоделированных масс HNL приведены в табл. 3

(рис. 3f). Обе комбинации W -бозона и лептона входят в распределение $M_{\Delta}(W\ell^-)$.

Таблица 2. Сечения (в фб), рассчитанные для исследованных фоновых каналов, и предполагаемое количество событий после всех отборов (указано в скобках). Ограничение $|\eta(\ell^-)| < 2.6$ применяется на уровне генерации для первичных отрицательных лептонов

Энергия СМ, пучки	1 ТэВ	3 ТэВ	10 ТэВ
Конечное состояние	e^+e^-	$\mu^+\mu^-$	$\mu^+\mu^-$
$W^+(q\bar{q})\ell^-\nu_\ell$	939 (1)	575 (2)	151 (3)
$W^+(q\bar{q})W^-(\ell^-\nu_\ell)$	3042 (1)	538 (1)	73.1 (0)
$W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})\ell^-\nu_\ell$	11.2 (66)	25.3 (26)	22.4 (73)
$W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})\ell^+\ell^-$	29.6 (54)	69.5 (9)	51.7 (36)
$W^+(q\bar{q})Z(q\bar{q})W^-(\ell^-\nu_\ell)$	57.7 (84)	34.5 (32)	10.1 (61)
$\gamma e^- \rightarrow W^+(q\bar{q})W^-(q\bar{q})e^-$	40.2 (1)	–	–

Е. Верхние пределы на параметры смешивания. Сигнальные события генерируются в CompHEP, предполагая три значения энергий СМ и разные массы HNL. Каждый набор данных содержит 1000 событий, при этом разрешены только распады $W \rightarrow q\bar{q}$. Реконструированные сигнальные события после всех ограничений показаны на рис. 4. Энергии СМ, массы HNL и число сигнальных событий для соответствующих значений масс приведены в табл. 3.

Для получения количества сигнальных событий массовые интервалы выбираются в соответствии с шириной сигнала. В каналах с электронным пучком массовые интервалы составляют ± 10 ГэВ, за исключением первого и последнего значений масс. В каналах с мюонными пучками интервал составляет $[0.94 - 1.03] \times M(N)$, за исключением первого и последнего значений массы. Интервалы для первого и последнего значений массы специально выбраны в соответствии с наблюдаемой шириной сигнала. Для оценки фона, лежащего под сигналом, определяет-

ся число фоновых событий, попадающих в такой же массовый интервал.

Была проверена эффективность восстановления сигнала для различных угловых распределений в распаде $N \rightarrow W^\pm \ell^\mp$. Сигнальные события генерировались в предположении равномерного и линейно зависящих распределений по $\cos(\theta_\ell^*)$. Эффективности, полученные после всех ограничений, примерно одинаковы для всех вариантов и лежат внутри интервала $\pm 5\%$. Это соответствует тому факту, что аксептансы и эффективности реконструкции лептона и W -бозона, образующихся при распаде HNL, отличаются незначительно.

В результате были вычислены верхние пределы параметров смешивания $|V_{\ell N}|^2$ в зависимости от $M(N)$ (рис. 5). Верхние пределы были рассчитаны,

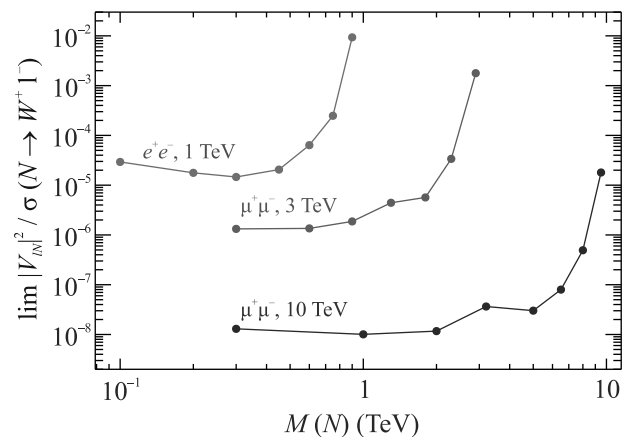


Рис. 5. (Цветной онлайн) Верхние пределы параметров смешивания $|V_{\ell N}|^2$ в зависимости от $M(N)$ для различных масс HNL, энергий СМ и пучков

предполагая, что превышение сигнала над фоном составляет 2σ , при этом число сигнальных событий не менее 8. Относительные вероятности распада

Таблица 3. Смоделированные массы HNL, сечения рождения, а также число сигнальных событий в выбранных промежуточных значениях масс, показанные при изучаемых энергиях в СМ и соответствующих пучках. Для каждого значения массы HNL генерируются выборки данных из 1000 событий, разрешены только распады $W \rightarrow q\bar{q}$

1 ТэВ, e^+e^-								
$M(N)$, ГэВ	100	200	300	450	600	750	900	
σ , фб	2.28	2.12	1.78	1.06	0.31	0.11	0.002	
Число событий	79	208	268	251	268	203	283	
3 ТэВ, $\mu^+\mu^-$								
$M(N)$, ГэВ	300	600	900	1300	1800	2300	2900	
σ , фб	12.4	10.9	9.33	5.85	2.33	0.53	0.01	
Число событий	322	358	303	254	400	295	297	
10 ТэВ, $\mu^+\mu^-$								
$M(N)$, ГэВ	300	1000	2000	3200	5000	6500	8000	9500
σ , фб	118.4	113.5	107.8	90.1	42.8	18.6	3.99	0.1
Число событий	349	462	426	263	457	356	291	294

$Br(N \rightarrow W^\pm \ell^\mp)$ неизвестны и полученные верхние пределы нормированы на указанное значение. Следует отметить, что HNL потенциально может распадаться в каналах $N \rightarrow W^+ e^-$ и $N \rightarrow W^+ \mu^-$. При использовании в анализе обеих мод ожидается дополнительное подавление фона, вызванного подавлением процессов слияния бозонов, однако этот эффект невелик.

Как видно на рис. 5, верхние пределы, полученные для процесса $e^+e^- \rightarrow NW^\pm \ell^\mp$ при энергии 1 ТэВ, несколько хуже полученных для процесса $e^+e^- \rightarrow N\nu_e$ [11]. Однако верхние пределы для процесса $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^\pm \ell^\mp$ сопоставимы при 3 ТэВ и превосходят процесс $\mu^+\mu^- \rightarrow N\nu_\mu$ [18] при энергии 10 ТэВ [18–20]. В указанных публикациях также показаны измеренные верхние пределы и оценки будущих верхних пределов на параметры смешивания ожидаемые на LHC.

IV. Заключение. Используя модельно-независимый подход к анализу лептонного сектора SM, расширенного майорановскими нейтрино, исследован процесс $\ell^+\ell^- \rightarrow NW^\pm \ell^\mp$ и получены верхние пределы на параметры смешивания $|V_{\ell N}|^2$ в зависимости от $M(N)$ для различных масс HNL, энергий и пучков СМ. Изученный процесс может обеспечить весьма конкурентноспособные значения верхних пределов, особенно при энергиях СМ в масштабах нескольких ТэВ.

Аналогичные процессы можно использовать для получения верхних пределов и в случае использования пучков одного знака, в частности в процессе $\mu^+\mu^+ \rightarrow NW^+\mu^+$. Для случая с пучками одного знака сечение сигнала и кинематика событий абсолютно такие же, как в процессе $\mu^+\mu^- \rightarrow NW^+\mu^-$, что приводит к одинаковому количеству сигнальных событий. Однако ожидается, что фон будет меньше, что

должно обеспечить несколько лучшие значения для верхних пределов параметров смешивания.

Мы благодарны А. Ф. Зарнецки и Д. Джинс за ценные комментарии.

Работа М. Д. поддержана грантом Российского научного фонда # 22-12-00152.

1. A. M. Abdullahi, P. B. Alzah, B. Batell et al. (Collaboration), J. Phys. G **50**(2), 020501 (2023)(Contribution to: Proceedings of Snowmass 2021).
2. F. F. Deppisch, P. S. Bhupal Dev, and A. Pilaftsis, New J. Phys. **17**(7), 075019 (2015).
3. W. Rodejohann, Int. J. Mod. Phys. E **20**, 1833 (2011).
4. T. Asaka and T. Tsuyuki, Phys. Rev. D **92**(9), 094012 (2015).
5. G. Aad, B. Abbott, K. Abeling et al. (ATLAS collaboration), arXiv:2305.14931.
6. A. Tumasyan, W. Adam, J. W. Andrejkovic et al. (CMS collaboration), Phys. Rev. Lett. **131**, 011803 (2023).
7. A. M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al. (CMS collaboration), Phys. Rev. Lett. **120**, 221801 (2018).
8. B. Fuks, J. Neundorff, K. Peters, R. Ruiz, and M. Saimpert, Phys. Rev. D **103**(5), 055005 (2021).
9. F. del Aguila, J. A. Aguilar-Saavedra, and R. Pittau, JHEP **10**, 047 (2007).
10. J. L. Schubert and O. Ruchayskiy, arXiv:2210.11294.
11. K. Mękała, J. Reuter, and A. F. Żarnecki, JHEP **06**, 010 (2022).
12. F. Almeida Jr., Y. Coutinho, J. Martins Simoes, M. do Vale, and S. Wulck, Eur. Phys. J. C **22**, 277 (2001).
13. E. Boos, V. Bunichev, M. Dubinin et al. (CompHEP Collaboration), Nucl. Instrum. Methods A **534**, 250 (2004).

14. A. Pukhov, E. Boos, M. Dubinin, V. Edneral, V. Ilyin, D. Kovalenko, A. Kryukov, V. Savrin, S. Shichanin, and A. Semenov, arXiv:hep-ph/9908288.
15. A. Alloul, N. D. Christensen, C. Degrande, C. Duhr, and B. Fuks, *Comput. Phys. Commun.* **185**, 2250 (2014).
16. W. Kilian, T. Ohl, and J. Reuter, *Eur. Phys. J. C* **71**, 1742 (2011).
17. J. de Favereau, C. Delaere, P. Demin, A. Giammanco, V. Lemaitre, A. Mertens, and M. Selvaggi (DELPHES 3 Collaboration), *JHEP* **02**, 057 (2014).
18. K. Mękała, J. Reuter, and A. F. Żarnecki, *Phys. Lett. B* **841**, 137945 (2023).
19. T. H. Kwok, L. Li, T. Liu, and A. Rock, arXiv:2301.05177.
20. P. Li, Z. Liu, K. F. Lyu, arXiv:2301.07117.
21. J. Alwall, M. Herquet, F. Maltoni, O. Mattelaer, and T. Stelzer, *JHEP* **06**, 128 (2011).
22. T. Li, C. Y. Yao, and M. Yuan, arXiv:2306.17368.
23. H. Gu and K. Wang, *Phys. Rev. D* **106**, 015006 (2022).
24. A. Semenov, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 431 (2009).
25. T. Sjostrand, S. Mrenna, and P. Skands, *J. High Energy Phys.* **05**, 026 (2006).
26. S. Banerjee, P. S. B. Dev, A. Ibarra, T. Mandal, and M. Mitra, *Phys. Rev. D* **92**, 075002 (2015).
27. J. L. Yang, C. H. Chang, and T. F. Feng, arXiv:2302.13247.
28. R. Jiang, T. Yang, S. Qian, Y. Ban, J. Li, Z. You, and Q. Li, arXiv:2304.04483.
29. J. Schechter and J. W. F. Valle, *Phys. Rev. D* **22**, 2227 (1980).
30. J. Casas and A. Ibarra, *Nucl. Phys. B* **618**, 171 (2001).
31. A. Ibarra, E. Molinaro, and S. Petcov, *JHEP* **09**, 108 (2010).
32. B. Pontecorvo, *Sov. Phys. JETP* **7**, 172 (1958).
33. Z. Maki, M. Nakagawa, and S. Sakata, *Prog. Theor. Phys.* **28**, 870 (1962).
34. T. Asaka, S. Eijima, and H. Ishida, *JHEP* **04**, 011 (2011).
35. K. Bondarenko, A. Boyarsky, J. Klaric, O. Mikulenko, O. Ruchayskiy, V. Syvolap, and I. Timiryasov, *JHEP* **07**, 193 (2021).
36. S. Alekhin, W. Altmannshofer, T. Asaka et al. (Collaboration), *Rep. Prog. Phys.* **79**, 124201 (2016).
37. M. Drewes, arXiv:2210.17110.
38. E. Boos, M. Dubinin, A. Pukhov, M. Sachwitz, and H. J. Schreiber, *Eur. Phys. J. C* **21**, 81 (2001).

Возбуждение электронной оболочки атома в двойном β -распаде

М. И. Криворученко⁺¹⁾, К. С. Тырин⁺¹⁾, Ф. Ф. Карпешин^{*1)}

⁺Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^{*}Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии имени Д. И. Менделеева (ВНИИМ),
190005 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 31 июля 2023 г.

После переработки 29 августа 2023 г.

Принята к публикации 30 августа 2023 г.

Исследуется вопрос о переходе в безнейтринном двойном β -распаде электронной оболочки атома в возбужденные состояния. Для моделирования энергетического спектра β -электронов, чувствительного к массе и майорановской природе нейтрино, вопрос имеет принципиальное значение. Зависимость полученных результатов от атомного номера указывает на определяющую роль механизма Фейнберга–Мигдала в возбуждении атомов. Нами найдены амплитуды перекрытия волновых функций электронных оболочек родительского атома и дочернего иона для одиннадцати атомов, двухнейтринный двойной β -распад которых наблюдался экспериментально. Только приблизительно в 1/4 случаев ожидается переход в основное состояние или в возбужденное состояние с наименьшей энергией, структура электронной оболочки которого наследуется от родительского атома. Переход дочернего иона в основное состояние в таких случаях сопровождается излучением фотонов ультрафиолетового диапазона, что может служить дополнительной сигнатурой двойного β -распада. Средняя энергия возбуждения электронной оболочки оказывается в пределах 300–800 эВ, причем дисперсия принимает еще большие значения: от 1.7 кэВ в кальции до 15 кэВ в уране.

DOI: 10.31857/S1234567823190023, EDN: xvkvd

В поисках отклонений от Стандартной модели (СМ) большой интерес представляют β -процессы, в первую очередь безнейтринный двойной β -распад ($0\nu2\beta$), который не сохраняет полное число лептонов. В кварковом секторе СМ аналогичное значение имеют процессы, не сохраняющие полное число барионов, такие как распад протона или нейтрон–антинейтронные осцилляции [1]. За рамками СМ любой механизм $0\nu2\beta$ -распада ведет к существованию майорановской массы нейтрино [2, 3]. В эффективной теории майорановская масса нейтрино, m_ν , генерируется оператором Вайнберга размерности $d = 5$ [4]. В отсутствие операторов размерности $d > 5$ и симметрии между левыми и правыми элементарными фермионами амплитуда $0\nu2\beta$ -распада для легких нейтрино пропорциональна m_ν .

Экспериментальные поиски $0\nu2\beta$ -распада активно ведутся на протяжении ряда десятилетий. В последнее время коллаборация GERDA, используя в качестве активного вещества изотоп ^{76}Ge , получила ограничение $m_\nu < 0.079\text{--}0.18$ эВ на доверительном уровне $\text{CL} = 90\%$ [5]. Близкие результаты получены

коллаборацией EXO [6] с использованием ксенона-136. Ограничение на майорановскую массу нейтрино $m_\nu < 0.3\text{--}0.9$ эВ также получено коллаборацией NEMO-3 с использованием молибдена-100 [7]. Эксперимент SuperNEMO находится в стадии подготовки [8]. В активной фазе находятся эксперименты CUORE с изотопом ^{130}Te [9, 10] и KamLAND-Zen с жидким ксеноном-136 [11].

Неопределенность верхнего предела на массу нейтрино обусловлена точностью вычислений ядерной части процесса [12–14].

Эксперименты по поиску $0\nu2\beta$ -распада сосредоточены на исследовании энергетического спектра более вероятного двухнейтринного двойного β -распада ($2\nu2\beta$) на границе фазового пространства, где сосредоточен вклад безнейтринной моды. Экспериментаторы неизбежно сталкиваются с проблемой, получившей широкую известность в связи с попытками измерения массы нейтрино в β -распаде трития: дочерний атом с высокой вероятностью переходит в возбужденное состояние. Это может быть возбужденное состояние молекулы, в состав которой входят активные атомы вещества. Сами атомы испытывают возмущение за счет “встряхивания” (shake-up и shake-off) или внутреннего рассеяния β -электронов.

¹⁾e-mail: mikhail.krivoruchenko@itep.ru; Tyrin_KS@nrcki.ru; fkarpeshin@yandex.ru

Теория этих процессов развита в работах Фейберга [15] и Мигдала [16]. Спектр β -электронов особенно заметно искажается вблизи границы фазового пространства. Эффект значительно возрастает из-за того, что разброс остаточных энергий возбуждения почти на порядок превышает среднее значение [17]. Аналогичное влияние можно ожидать со стороны химического сдвига [18].

Эффекты возбуждения и ионизации атомов, первоначально изученные в контексте ядерной физики, наблюдаются в молекулярных, твердотельных системах и играют ключевую роль в экспериментах LUX [19], XENON1T [20], DarkSide-50 [21], нацеленных на регистрацию взаимодействия частиц темной материи с веществом.

В двойном β -распаде дочерний ион с высокой вероятностью оказывается в возбужденном состоянии [22–25], что уменьшает энергию, уносимую β -электронами. В пренебрежении отдачей ядра энергетический спектр β -электронов в $0\nu 2\beta$ -распаде представляет собой дельта функцию, размытую атомными эффектами. Данный пик рассматривается в качестве сигнатуры $0\nu 2\beta$ -распада. В распаде реализуется сценарий, при котором в вероятности доминируют каналы с возбуждением валентных электронов дочернего иона, в то время как средняя энергия возбуждения, $\mathcal{M}$, и ее дисперсия, $\mathcal{D}$, насыщаются сравнительно редкими переходами в континуум электронов, заселяющих внутренние уровни.

В настоящей работе дана оценка вероятного отклонения энергии β -электронов от энергосвечения в $0\nu 2\beta$ -распадах 11 атомов, для которых $2\nu 2\beta$ -распад наблюдался экспериментально.

В среднетяжелых и тяжелых атомах энергия связи электронов на К оболочке отличается от энергии связи валентных электронов примерно на три порядка ($\sim Z^2$), поэтому качественно оценить масштаб $\mathcal{M}$ и $\mathcal{D}$ весьма затруднительно. В вероятности распадов доминируют состояния с возбуждением валентных электронов, имеющих малую энергию связи. Оценки, однако, приводят к неожиданно большим значениям средней энергии возбуждения и дисперсии. Учитывая также, что в многочастичных задачах точность вычислений ограничена, в работе рассмотрены альтернативные подходы, включая модель Томаса–Ферми (TF) [26], модель Томаса–Ферми–Дирака–Вайцзеккера (TFDW) [27–31], нерелятивистский формализм Рутаана–Хартри–Фока (RHF) [32] и релятивистский формализм Дирака–Хартри–Фока (DHF) [33–37]. Сравнение результатов позволяет оценить масштаб неопределенностей электронных оболочек атомов.

Каждый из перечисленных подходов имеет свои преимущества и ограничения. В отличие от модели TF, в модели TFDW плотность электронов в нуле конечна, что позволяет определить дисперсию в рамках модели. В методе RHF волновые функции электронов параметризуются аналитически, что позволяет оценить обменные вклады в дисперсию и другие наблюдаемые, однако применимость метода ограничена легкими и среднетяжелыми атомами. В рамках DHF результаты расчета основных свойств электронных оболочек атомов табулированы в работах [33–35] и реализованы в виде пакетов программ, таких как GRASP-2018 [36, 37] и RAINE [38, 39].

Далее используется система атомных единиц $\hbar = m = e = 1$, $c = 137$, где m – масса электрона, e – заряд протона, c – скорость света. Обозначим $\hat{H}_{Z,N}$ гамильтониан N электронов в ионе с зарядом ядра Z , $|Z, N\rangle$ – основное состояние, $E_{Z,N}$ – энергия связи электронной оболочки иона, $\hat{H}_{Z,N}|Z, N\rangle = E_{Z,N}|Z, N\rangle$.

Гамильтониан электронной оболочки дочернего иона связан с гамильтонианом электронной оболочки родительского нейтрального атома соотношением

$$\hat{H}_{Z+2,Z} = \hat{H}_{Z,Z} - 2 \sum_i \frac{1}{r_i}, \quad (1)$$

где $r_i = |\mathbf{r}_i|$, $\mathbf{r}_i$ – координата i -го электрона, суммирование проводится по $i = 1, \dots, Z$. В следующий момент после встряхивания электронная оболочка дочернего иона находится в состоянии $|Z, Z\rangle$, в то время как ядро имеет заряд $Z+2$. Средняя энергия возбуждения электронной оболочки дочернего иона определяется соотношением

$$\mathcal{M} = \langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2,Z} | Z, Z \rangle - \langle Z+2, Z | \hat{H}_{Z+2,Z} | Z+2, Z \rangle \quad (2)$$

или, с учетом уравнения (1),

$$\mathcal{M} = E_{Z,Z} + 2Z^{-1}E_{Z,Z}^C - E_{Z+2,Z}, \quad (3)$$

где $E_{Z,N}^C$ – энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром.

В таблице 1 представлены результаты расчета энергии возбуждения в моделях TF, TFDW и DHF. Сначала находятся величины $\mathcal{M}'$, которые отличаются от $\mathcal{M}$ заменой в уравнении (3) $E_{Z+2,Z}$ на $E_{Z+2,Z+2}$. Разность этих величин равна энергии двукратной ионизации, I_2 ; имеет место соотношение $\mathcal{M} = \mathcal{M}' - I_2$. Экспериментальные значения I_2 находятся из таблиц [40].

В модели TF вычисления проводятся по схеме [17]. Модель TFDW, являясь обобщением модели TF,

Таблица 1. Средняя энергия возбуждения электронной оболочки дочернего иона и ее дисперсия для одиннадцати атомов, $2\nu/2\beta$ -распад которых наблюдался экспериментально. Во второй колонке приводятся значения разности масс, Q , нейтральных атомов, участвующих в распаде. В четвертой колонке даны интегралы перекрытия оболочек родительского атома и дочернего дважды ионизованного иона, найденные с помощью пакета программ GRASP-2018 [36, 37]. Далее показаны средняя энергия возбуждения $\mathcal{M}$ электронной оболочки дочернего иона в моделях TF, TFDW и DHF, верхняя граница дисперсии $\bar{\mathcal{D}}$ в моделях TF, TFDW и дисперсия $\mathcal{D}$ в методах DHF и RHF. Величины $\mathcal{M}_{\text{DHF}}$ и $\mathcal{D}_{\text{DHF/a}}$ без учета обменных вкладов получены с использованием результатов работ [35] и [34], соответственно. $\mathcal{D}_{\text{DHF/b}}$ включает обменные вклады. Для вычисления $\mathcal{D}_{\text{RHF/a}}$ без учета и $\mathcal{D}_{\text{RHF/b}}$ с учетом обменных вкладов используются волновые функции орбиталей в методе RHF [32]. Энергия двукратной ионизации I_2 [40] округляется до трех значащих цифр. Предсказания нерелятивистских моделей ограничены значениями заряда ядра $Z \leq 54$

Процесс	Q (кэВ)	Ссыл- ка	K_Z	$\mathcal{M}_{\text{TF}}$ (эВ)	$\mathcal{M}_{\text{TFDW}}$ (эВ)	$\mathcal{M}_{\text{DHF}}$ (эВ)	I_2 (эВ)	$\bar{\mathcal{D}}_{\text{TF}}^{1/2}$ (кэВ)	$\bar{\mathcal{D}}_{\text{TFDW}}^{1/2}$ (кэВ)	$\mathcal{D}_{\text{DHF/a}}^{1/2}$ (кэВ)	$\mathcal{D}_{\text{DHF/b}}^{1/2}$ (кэВ)	$\mathcal{D}_{\text{RHF/a}}^{1/2}$ (кэВ)	$\mathcal{D}_{\text{RHF/b}}^{1/2}$ (кэВ)
$^{48}_{20}\text{Ca} \rightarrow ^{48}_{22}\text{Ti}$	4267.98(32)	[42]	0.466	335	247	299	20.4	1.25	2.43	1.70	1.65	1.66	1.61
$^{76}_{32}\text{Ge} \rightarrow ^{76}_{34}\text{Se}$	2039.006(50)	[43]	0.575	383	246	369	30.9	2.16	3.92	2.88	2.77	2.72	2.62
	2039.061(7)	[5]											
$^{82}_{34}\text{Se} \rightarrow ^{82}_{36}\text{Kr}$	2997.9(3)	[44]	0.597	384	238	377	38.4	2.31	4.17	3.09	2.97	2.90	2.79
$^{96}_{40}\text{Zr} \rightarrow ^{96}_{42}\text{Mo}$	3356.097(86)	[45]	0.518	422	246	409	23.3	2.78	4.92	3.76	3.60	3.44	3.29
$^{100}_{42}\text{Mo} \rightarrow ^{100}_{44}\text{Ru}$	3034.40(17)	[46]	0.564	428	241	419	24.1	2.94	5.17	4.00	3.82	3.62	3.46
$^{116}_{48}\text{Cd} \rightarrow ^{116}_{50}\text{Sn}$	2813.50(13)	[47]	0.601	451	229	442	22.0	3.42	5.92	4.74	4.51	4.17	3.97
$^{128}_{52}\text{Te} \rightarrow ^{128}_{54}\text{Xe}$	865.87(131)	[48]	0.589	452	206	457	33.1	3.74	6.42	5.29	5.04	4.53	4.32
$^{130}_{52}\text{Te} \rightarrow ^{130}_{54}\text{Xe}$	2526.97(23)	[47]	0.589	452	206	457	33.1	3.74	6.42	5.29	5.04	4.53	4.32
$^{136}_{54}\text{Xe} \rightarrow ^{136}_{56}\text{Ba}$	2457.83(37)	[49]	0.606	476	217	465	15.2	3.91	6.67	5.57	5.31	4.71	4.49
$^{150}_{60}\text{Nd} \rightarrow ^{150}_{62}\text{Sm}$	3371.38(20)	[50]	0.519			514	16.7			6.50	6.20		
$^{238}_{92}\text{U} \rightarrow ^{238}_{94}\text{Pu}$	1437.3	[51]	0.546			774	17.5			14.58	13.90		

дополнительно учитывает обменный вклад в энергию электронов [27] и пространственную неоднородность [28]. Последовательное квазиклассическое разложение функционала плотности с учетом неоднородности можно найти в монографии Киржница [29]. В простейшем виде

$$E_{Z,N} = \int d\mathbf{r} \left(-\frac{Z}{r}n(\mathbf{r}) + c_1 n^{5/3}(\mathbf{r}) + c_2 n^{4/3}(\mathbf{r}) + c_3 \frac{(\nabla n(\mathbf{r}))^2}{n(\mathbf{r})} \right) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} n(\mathbf{r}'). \quad (4)$$

Здесь $n(\mathbf{r})$ – плотность электронов, первое слагаемое под знаком интеграла – энергия взаимодействия электронов с ядром $E_{Z,N}^C$, второе слагаемое – кинетическая энергия, третье – обменная энергия, четвертое – градиентная поправка Вайзеккера [28]. Последнее слагаемое – энергия взаимодействия электронов. Коэффициенты c_i равны

$$c_1 = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}, \quad c_2 = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3}, \quad c_3 = \frac{\lambda}{8}. \quad (5)$$

В феноменологических моделях используется значение $\lambda = 1/5$ [30, 31].

В работе [30] в рамках TFDW вычисляется энергия связи нейтральных атомов N, Ne, Ar, Kr, Xe с заполненными валентными оболочками. Параметризация результатов дает $E_{Z,Z} = -0.536Z^{2.38}$, что

не сильно отличается от модели TF, где $E_{Z,Z} = -0.764Z^{7/3}$. Энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром вычисляется с помощью известной функции экранирования. Интегрируя по частям выражение для $E_{Z,Z}^C$, лапласиан перебрасывается на кулоновский потенциал ядра, что дает дельта-функцию в нуле, умноженную на разность полного потенциала и потенциала ядра. Энергия взаимодействия с ядром оказывается равной $Z^2(a-b)$, параметры экранирующей функции a и b приведены в табл. 2 работы [30]. Фитирование дает $E_{Z,Z}^C = -1.270Z^{2.38}$ в согласии с теоремой вириала. Точность параметризации не хуже 0.5 %. Соответствующие результаты для $\mathcal{M}$ показаны в табл. 1. Предсказания нерелятивистских моделей TF и TFDW ограничены значениями $Z \leq 54$.

Средние величины $\langle Z, Z | r_i^{-1} | Z, Z \rangle$, необходимые для оценки $E_{Z,Z}^C$ в методе DHF, табулированы в работах [32–35]. В работе [35] отдельно приводятся значения $E_{Z,Z}^C$. Результаты вычислений $\mathcal{M}$ в рамках DHF [35] показаны в табл. 1.

Модели TF и DHF хорошо согласуются друг с другом и согласуются качественно с предсказаниями модели TFDW.

Дисперсия энергии возбуждения электронной оболочки определяется формулой

$$\mathcal{D} = \langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2}^2 | Z, Z \rangle - \langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2} | Z, Z \rangle^2. \quad (6)$$

С учетом уравнения (1) имеем

$$\frac{1}{4}\mathcal{D} = \sum_{ij} \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} \frac{1}{r_j} | Z, Z \rangle - \langle Z, Z | \sum_i \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle^2. \quad (7)$$

Суммирование проводится в интервале $1 \leq i, j \leq Z$. В моделях TF и TFDW двухчастичная плотность электронов не определена, однако, удастся определить верхнюю границу дисперсии [17]:

$$\frac{1}{4}\bar{\mathcal{D}} = \int d\mathbf{r} \frac{1}{r^2} n(\mathbf{r}) - Z^{-1} \left(\int d\mathbf{r} \frac{1}{r} n(\mathbf{r}) \right)^2. \quad (8)$$

Вычисление интеграла от $1/r^2$ по распределению электронной плотности в модели TFDW приводит к значениям, которые можно параметризовать в виде

$$\int d\mathbf{r} \frac{1}{r^2} n(\mathbf{r}) = 5.81 Z^{2.00}. \quad (9)$$

Точность параметризации не хуже 5 %. Величины $\bar{\mathcal{D}}$ в моделях TF и TFDW приведены в табл. 1.

В методе DHF возможна оценка не только верхней границы дисперсии, но и самой дисперсии. В пренебрежении обменными эффектами $\mathcal{D}$ находится из уравнения (7) после факторизации средней величины под знаком двойного суммирования. Соответствующие результаты, использующие табличные значения средних $1/r_i$ и $1/r_i^2$ для электронных орбит [34], показаны в табл. 1.

Обменные эффекты учитываются посредством усреднения двух-частичного оператора по волновой функции электронной оболочки атома. В однодетерминантном приближении волновая функция имеет вид

$$\Psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \epsilon^{s_1 s_2 \dots s_N} \phi_{\alpha_{s_1}}^1 \phi_{\alpha_{s_2}}^2 \dots \phi_{\alpha_{s_N}}^N, \quad (10)$$

где ϕ_{α}^i – волновые функции электронов, индекс $i = 1, \dots, N$ нумерует пространственные координаты и спинные индексы, индекс α нумерует квантовые числа орбиталей. В рассматриваемом случае $\alpha = (njl m)$, где n – главное квантовое число, j – полный угловой момент, m – его проекция, $l = j \pm 1/2$ – орбитальный угловой момент. Фиксированный набор квантовых чисел $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ определяет состояние электронной оболочки атома. Тензор $\epsilon^{s_1 s_2 \dots s_N} = \pm 1$ осуществляет антисимметризацию.

Функции ϕ_{α}^i ортонормированы. Запишем их в виде произведения радиальной и угловой части:

$$\phi_{njl m}^i = R_{njl}(r_i) \Omega_{jm}^l(\mathbf{n}_i). \quad (11)$$

Здесь $R_{njl}(r)$ – вещественная функция, $\Omega_{jm}^l(\mathbf{n})$ – шаровой спинор, зависящий от единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Обозначим через $\varkappa_{njl}$ числа заполнения

уровней с квантовыми числами (njl) . В случае полностью заполненных уровней, а также случаях, допускающих для каждой пары (jl) существование не более одного частично заполненного уровня с максимальным угловым моментом, $j^{\max} = \varkappa_{njl}(2j + 1 - \varkappa_{njl})/2$, можно упростить выражение (7), заменив суммирование по электронам суммированием по уровням:

$$\frac{1}{4}\mathcal{D} = \sum_{njl} \varkappa_{njl} \langle njl | r^{-2} | njl \rangle - \sum_{nn'jl} \min(\varkappa_{njl}, \varkappa_{n'jl}) \langle njl | r^{-1} | n'jl \rangle^2. \quad (12)$$

Матричные элементы $h(r)$ определены согласно

$$\langle njl | h(r) | n'jl \rangle = \int r^2 dr h(r) R_{njl}(r) R_{n'jl}(r). \quad (13)$$

Сумма диагональных компонент $n = n'$ уравнения (12) совпадает с правой частью уравнения (7) при факторизации среднего значения под знаком двойной суммы, как это предполагается в оценках TF и TFDW. Компоненты $n \neq n'$ во втором слагаемом уравнения (12) связаны с обменными эффектами. Обменные эффекты уменьшают дисперсию.

В методе RHF функции $R_{njl}(r)$ табулированы [32]. Для вычисления дисперсии с учетом обменных эффектов требуется знание переходных матричных элементов $\langle njl | r^{-1} | n'jl \rangle$ и $\langle njl | r^{-2} | n'jl \rangle$. В таблице 2 представлены результаты вычислений для атома молибдена в методе RHF. Диагональные матричные элементы сравниваются с таковыми в методе DHF [34]. Заметна недооценка средних величин в сравнении с методом DHF, что обусловлено смещением в релятивистских моделях электронной плотности на меньшие расстояния [37]. Сходная картина имеет место для других атомов. Соответственно, дисперсия в методе RHF без учета обменных вкладов также меньше предсказаний метода DHF.

Средние значения $1/r$ и $1/r^2$ на внутренних и внешних орбитах атомов соотносятся примерно как $Z : 1$ и $Z^2 : 1$, что подтверждается значениями диагональных матричных элементов в табл. 2. В тех случаях, когда полный угловой момент частично заполненного уровня не является максимальным и/или когда частично заполненных уровней для некоторой пары (jl) несколько, формула (12) используется для приближенной оценки. Поскольку в среднетяжелых и тяжелых атомах основной вклад в дисперсию дают электроны на заполненных внутренних оболочках, можно ожидать, что точность такой оценки достаточно высока.

Результаты вычислений $\mathcal{D}$ в методе RHF с учетом обменных вкладов представлены в табл. 1. Для сравнения приведены результаты вычислений без учета обменных вкладов. Согласие моделей TF, TFDW, RHF и DHF является удовлетворительным. Для приложений можно рекомендовать значения энергии возбуждения – $\mathcal{M}_{\text{DHF}}$, для дисперсии – $\mathcal{D}_{\text{DHF}/b}$, как теоретически наиболее обоснованные. Оценка $\mathcal{D}_{\text{DHF}/b}$ отличается от $\mathcal{D}_{\text{DHF}/a}$ тем, что включает обменные поправки, найденные по методу RHF. С учетом приближений неопределенности в $\mathcal{M}_{\text{DHF}}$ и $\mathcal{D}_{\text{DHF}/b}$ оцениваются на уровне $\lesssim 10\%$.

В нерелятивистских моделях TF, TFDW и RHF $\mathcal{M}$ слабо зависит от Z , в то время как $\mathcal{D}$ растет примерно как Z^2 . Данное поведение согласуется с выделенной ролью K электронов, нерелятивистская теория возбуждения которых в процессах β -распада развита в работах [15, 16].

Параметр K_Z , приведенный в табл. 1, представляет собой амплитуду перекрытия волновой функции всех электронов основного состояния оболочки родительского атома с волновой функцией оболочки дважды ионизированного дочернего атома, электроны которого сохранили свою исходную конфигурацию. Поскольку заряды ядер до и после встряхивания отличаются на двойку, соответствующие волновые функции электронов не ортогональны, вследствие чего перекрытие волновых функций с одинаковыми квантовыми числами не равно единице. Это приводит к возбуждению дочернего иона. Величина K_Z^2 задает вероятность наследования электронами квантовых чисел и, соответственно, отсутствия эффектов встряхивания. Для оценки K_Z требуется многочастичный расчет методом DHF, который был выполнен с использованием программного пакета GRASP-2018 [36, 37]. Для каждого родительского атома из табл. 1 с электронной конфигурацией и полным угловым моментом, соответствующим основному состоянию электронной оболочки родительского атома, получен набор больших $f_{njl}^+(r)$ и малых $f_{njl}^-(r)$ радиальных компонент волновых функций электронов для всех квантовых чисел (njl) . Аналогично для дочернего иона с зарядом ядра $Z + 2$ получен набор радиальных компонент $\tilde{f}_{njl}^\pm(r)$. Амплитуда перекрытия $\mathcal{O}_{njl}$ волновых функций электронов с одинаковыми квантовыми числами равна

$$\mathcal{O}_{njl} = \int \left(\tilde{f}_{njl}^+(r) f_{njl}^+(r) + \tilde{f}_{njl}^-(r) f_{njl}^-(r) \right) r^2 dr.$$

В однодетерминантном приближении и без учета обменных слагаемых амплитуда K_Z равна произведе-

нию амплитуд $\mathcal{O}_{njl}$ в степени, равной заселенности соответствующего уровня:

$$K_Z = \prod_{njl} (\mathcal{O}_{njl})^{x_{njl}}. \quad (14)$$

В широком диапазоне атомных номеров Z значения K_Z оказываются близки к величине 0.5. Вероятность $K_Z^2 \sim 0.25$ достаточно мала, что указывает на доминирование в вероятности каналов с возбужденной электронной оболочкой атомов [22]. В описанном выше подходе для вычисления K_Z предполагается, что результирующая конфигурация дочернего иона является основным состоянием при наследовании квантовых чисел электронов. Однако спектроскопический анализ показывает, что это условие не всегда выполняется. Например, ион Ti III, образовавшийся после $0\nu 2\beta$ -распада Ca с электронной конфигурацией $[\text{Ar}]4s^2$, в основном состоянии имеет конфигурацию $[\text{Ar}]3d^2$. Строго говоря, этот факт означает, что перекрытие в точности равно нулю: $K_Z = 0$, следовательно, распад с вероятностью единица сопровождается возбуждением электронной оболочки атома. Энергия конфигурации $[\text{Ar}]4s^2$ Ti III превышает таковую конфигурации $[\text{Ar}]3d^2$ на 12.7 эВ. Аналогичная ситуация имеет место в двойном β -распаде атомов Zr, Mo, Nd и U. В перечисленных случаях амплитуда K_Z , приведенная в табл. 1, является амплитудой перехода в наиболее вероятное возбужденное состояние электронной оболочки дочернего иона. Примерно в каждом четвертом случае двойной β -распад Ca, Zr, Mo, Nd и U сопровождается переходом электронной оболочки атомов из фиксированного возбужденного состояния в основное состояние с излучением серии фотонов ультрафиолетового диапазона. Наблюдение этих фотонов, энергия которых хорошо известна, может служить вспомогательной сигнатурой для идентификации распада.

Знание параметров K_Z , $\mathcal{M}$ и $\mathcal{D}$ позволяет строить простейшие модели распределения энергии β -электронов в $0\nu 2\beta$ -распаде. С вероятностью K_Z^2 электронная оболочка атома остается в основном состоянии, с вероятностью $1 - K_Z^2$ переходит в возбужденное состояние. Условную вероятность перехода в возбужденное состояние с энергией ϵ в интервале $d\epsilon$ обозначим $w(\epsilon/Q^*)d\epsilon/Q^*$, где $Q^* = Q - I_2$ - энерговыделение.

Полная плотность вероятности принимает вид

$$p(\epsilon) = K_Z^2 \delta(\epsilon) + (1 - K_Z^2) w(\epsilon/Q^*)/Q^*. \quad (15)$$

В качестве $w(x)$ используется биномиальное распределение, находящее широкое применение при мо-

Таблица 2. Матричные элементы $\langle njl|r^{-1}|n'jl\rangle$ и $\langle njl|r^{-2}|n'jl\rangle$ для электронных орбиталей $n \leq n'$ в атоме молибдена. Вычисления используют волновые функции электронов метода RHF [32] с вырождением по j . В нижней части таблицы помещены диагональные матричные элементы $n = n'$ релятивистского метода DHF [34]; верхняя и нижняя строки P и D волн относятся к $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$, соответственно

⁴² Mo												
$\langle njl r^{-1} n'jl\rangle$	1S	2S	3S	4S	5S		2P	3P	4P		3D	4D
1S	41.49	7.962	3.231	−1.255	0.321							
2S		9.378	2.160	−0.803	0.204	2P	9.339	−1.858	−0.626			
3S			3.264	−0.665	0.163	3P		3.164	0.582	3D	2.970	−0.361
4S				1.171	−0.149	4P			1.052	4D		0.714
5S					0.327							
[34]	43.55	9.939	3.409	1.209	0.322		9.412	3.190	1.059		2.958	0.695
							9.879	3.300	1.089		2.987	0.705
$\langle njl r^{-2} n'jl\rangle$	1S	2S	3S	4S	5S		2P	3P	4P		3D	4D
1S	3455.	984.9	410.3	−160.1	40.94							
2S		357.8	141.7	−55.02	14.06	2P	118.4	−37.69	−13.17			
3S			65.20	−24.42	6.223	3P		21.34	6.697	3D	11.17	−2.120
4S				10.41	−2.564	4P			3.157	4D		0.965
5S					0.748							
[34]	4005.	439.4	80.03	12.73	0.830		120.7	21.93	3.243		11.11	0.930
							141.5	25.50	3.744		11.37	0.960

делировании случайных процессов [41]. Распределение обладает двумя свободными параметрами, которые фиксируются нормировкой на среднее значение $\mathcal{M} = \int_0^{Q^*} d\epsilon \epsilon p(\epsilon)$ и средний квадрат энергии $\mathcal{D} + \mathcal{M}^2 = \int_0^{Q^*} d\epsilon \epsilon^2 p(\epsilon)$.

Оценим максимальное отклонение, $\Delta T_{\max}$, энергии β -электронов от энергосвободного Q^* , основываясь на предсказаниях модели DHF. При фиксированной вероятности, p_T , уравнение $p_T = \int_0^{\Delta T_{\max}} d\epsilon p(\epsilon)$ позволяет найти $\Delta T_{\max}$. Для $p_T = 0.9$ отклонение от Q^* не превышает $\Delta T_{\max} = 180$ эВ (Ca), 18 эВ (Ge), 19 эВ (Se), $\Delta T_{\max} < 5$ эВ для Zr, Mo, Cd, Te, Xe, Nd, U. С вероятностью $p_T = 0.95$ отклонение не превышает $\Delta T_{\max} = 1.16$ кэВ (Ca), 0.55 кэВ (Ge), 0.44 кэВ (Se), 0.25 кэВ (Zr), 0.18 кэВ (Mo), 69 эВ (Cd), 22 эВ (¹²⁸Te), 30 эВ (¹³⁰Te), 19 эВ (Xe), 11 эВ (Nd), $\Delta T_{\max} < 5$ эВ для U. Для более точных оценок необходима детализация динамики многоэлектронных процессов.

В калориметрических детекторах разрешение по энергии достигает нескольких кэВ (GERDA), при этом измеряется полная энергия реакции за вычетом энергии нейтрино. В эксперименте SuperNEMO с помощью трекового калориметра в $0\nu 2\beta$ -распаде селена измеряется энергия β -электронов с точностью 4% при энергии Q . Для наблюдения эффектов, связанных с возбуждением электронной оболочки атомов, требуется развитие новых технологий, позволяющих существенно улучшить разрешение детекторов по энергии.

Таким образом, для всех атомов, $2\nu 2\beta$ -распад которых наблюдался экспериментально, определены амплитуды перекрытия электронных оболочек родительского атома и дочернего иона. В двойном β -распаде атомов ⁸²Se, ⁹⁶Zr, ¹⁰⁰Mo, ¹⁵⁰Nd и ²³⁸U с вероятностью $\sim 1/4$ электронная оболочка оказывается в низшем возбужденном состоянии с квантовыми числами, унаследованными от родительского атома. Эти распады сопровождаются последующим переходом в основное состояние с характеристическим излучением фотонов ультрафиолетового диапазона. В атомах ⁴⁸Ca, ⁷⁶Ge, ¹¹⁶Cd, ¹²⁸Te, ¹³⁰Te, ¹³⁶Xe электронная оболочка дочернего иона с вероятностью $\sim 1/4$ переходит в основном состоянии и с вероятностью $\sim 3/4$ – в возбужденное. Для всех рассмотренных случаев найдены среднее значение и дисперсия энергии возбуждения. Зависимость от атомного номера указывает на доминирующий вклад в дисперсию механизма Фейнберга–Мигдала. Для безнейтринной моды двойного β -распада определены вероятностные отклонения энергии β -электронов от энергосвободного.

Работа выполнена при поддержке гранта # 23-22-00307 Российского научного фонда.

1. D. G. Phillips II, W. M. Snow, K. Babu et al. (Collaboration), Phys. Rep. **612**, 1 (2016).
2. J. Schechter and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D **25**, 2951 (1982).

3. M. Hirsch, S. Kovalenko, and I. Schmidt, Phys. Lett. B **642**, 106 (2006).
4. S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. **43**, 1566 (1979).
5. The GERDA Collaboration, Nature **544**, 47 (2017).
6. G. Anton, I. Badhrees, P.S. Barbeau et al. (EXO-200 Collaboration), Phys. Rev. Lett. **123**, 161802 (2019).
7. R. Arnold, C. Augier, J.D. Baker et al. (NEMO-3 Collaboration), Phys. Rev. D **89**, 111101(R) (2014).
8. R. Arnold, C. Augier, J.D. Baker et al. (NEMO-3 Collaboration), Phys. Rev. D **92**, 072011 (2015).
9. D.Q. Adams, C. Alduino, K. Alfonso et al. (CUORE Collaboration), Phys. Rev. Lett. **124**, 122501 (2020).
10. D.Q. Adams, C. Alduino, K. Alfonso et al. (CUORE Collaboration), Nature **604**, 53 (2022).
11. S. Abe, S. Asami, M. Eizuka et al. (KamLAND-Zen Collaboration), Phys. Rev. Lett. **130**, 051801 (2023).
12. F. Šimkovic, A. Faessler, V. Rodin, P. Vogel, and J. Engel, Phys. Rev. C **77**, 045503 (2008).
13. J. T. Suhonen, Front. Phys. **5**, 55 (2017).
14. Ф. Шимковиц, УФН **191**, 1307 (2021) [F. Šimkovic, Phys.-Uspekhi **64**, 1238 (2021)].
15. E. L. Feinberg, J. Phys. (USSR) **4**, 423 (1941).
16. А. Мигдал, ЖЭТФ **11**, 207 (1941).
17. М. И. Криворученко, К. С. Тырин, Ф. Ф. Карпешин, Письма в ЖЭТФ **117**, 887 (2023) [M. I. Krivoruchenko, K. S. Tyrin, and F. F. Karpeshin, JETP Lett. **117**, 884 (2023)].
18. I. Lindgren, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **137–140**, 59 (2004).
19. D.S. Akerib, S. Alsum, H.M. Araújo et al. (LUX Collaboration), Phys. Rev. Lett. **122**, 131301 (2019).
20. E. Aprile, J. Aalbers, F. Agostini et al. (XENON Collaboration), Phys. Rev. Lett. **123**, 241803 (2019).
21. P. Agnes, I.F.M. Albuquerque, T. Alexander et al. (DarkSide Collaboration), Phys. Rev. Lett. **130**, 101001 (2023).
22. M. I. Krivoruchenko and K. S. Tyrin, Eur. Phys. J. A **56**, 16 (2020).
23. F. F. Karpeshin, M. B. Trzhaskovskaya, and L. F. Vitushkin, Yad. Fiz. **83**, 344 (2020) [F. F. Karpeshin, M. B. Trzhaskovskaya, and L. F. Vitushkin, Phys. At. Nucl. **83**, 608 (2020)].
24. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Yad. Fiz. **85**, 387 (2022) [F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. At. Nucl. **85** (2020)].
25. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **107**, 045502 (2023).
26. L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory. Course of Theoretical Physics*, 3rd ed., Pergamon, London (1977), v. 3.
27. P. A. M. Dirac, Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **26**, 376 (1930).
28. C. F. von Weizsäcker, Zeitschrift für Physik **96**, 431 (1935).
29. D. A. Kirzhnits, *Field Theoretical Methods in Many-Body Systems*, Pergamon Press, Oxford (1967), p. 394.
30. E. K. U. Gross and R. M. Dreizler, Phys. Rev. A **20**, 1798 (1979).
31. W. Stich, E. K. U. Gross, P. Malzacher, and R. M. Dreizler, Z. Phys. A **309**, 5 (1982).
32. E. Clementi and C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables **14**, 177 (1974).
33. C. C. Lu, T. A. Carlson, F. B. Malik, T. C. Tucker, and C. W. Nestor, Jr., At. Data Nucl. Data Tables **3**, 1 (1971).
34. J. P. Desclaux, At. Data Nucl. Data Tables **12**, 311 (1973).
35. K.-N. Huang, M. Aoyagi, M. H. Chen, B. Grasmann, and H. Mark, At. Data Nucl. Data Tables **18**, 243 (1976).
36. K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia, and E. P. Blumner, Comput. Phys. Commun. **55**, 425 (1989).
37. I. P. Grant, *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation*, Springer Science + Business Media, N.Y. (2007).
38. I. M. Band, M. A. Listengarten, M. B. Trzhaskovskaya, and V. I. Fomichev, *Computer Program Complex RAINE I–IV*, Leningrad Nuclear Physics Institute Reports LNPI-289 (1976), LNPI-298 (1977), LNPI-299 (1977), and LNPI-300 (1977).
39. I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor Jr., P. O. Tikkanen, and S. Raman, At. Data Nucl. Data Tables **81**, 1 (2002).
40. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2022), NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10), <https://physics.nist.gov/asd>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg; MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>.
41. В. С. Королюк, Н. И. Портенко, А. В. Скороход, А. Ф. Турбин, *Справочник по теории вероятностей и математической статистике*, Наука, М. (1985), 640 с.
42. A. A. Kwiatkowski, T. Brunner, J. D. Holt, A. Chaudhuri, U. Chowdhury, M. Eibach, J. Engel, A. T. Gallant, A. Grossheim, M. Horoi, A. Lennarz, T. D. Macdonald, M. R. Pearson, B. E. Schultz, M. C. Simon, R. A. Senkov, V. V. Simon, K. Zuber, and J. Dilling, Phys. Rev. C **89**, 045502 (2014).
43. M. Suhonen, I. Bergström, T. Fritioff, Sz. Nagy, A. Solders, and R. Schuch, J. Instrum. **2**, 06003 (2007).
44. D. L. Lincoln, J. D. Holt, G. Bollen, and M. Brodeur, S. Bustabad, J. Engel, S. J. Novario, M. Redshaw, R. Ringle, and S. Schwarz, Phys. Rev. Lett. **110**, 012501 (2013).

45. M. Alanssari, D. Frekers, T. Eronen et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **116**, 072501 (2016).
46. S. Rahaman, V.-V. Elomaa, T. Eronen, J. Hakala, A. Jokinen, J. Julin, A. Kankainen, A. Saastamoinen, J. Suhonen, C. Weber, and J. Aysto, Phys. Lett. B **662**, 111 (2008).
47. S. Rahaman, V.-V. Elomaa, T. Eronen, J. Hakala, A. Jokinen, A. Kankainen, J. Rissanen, J. Suhonen, C. Weber, and J. Aysto, Phys. Lett. B **703**, 412 (2011).
48. N.D. Scielzo, S. Caldwell, G. Savard, J.A. Clark, C.M. Deibel, J. Fallis, S. Gulick, D. Lascar, A.F. Levand, G. Li, J. Mintz, E.B. Norman, K.S. Sharma, M. Sternberg, T. Sun, and J. van Schelt, Phys. Rev. C **80**, 025501 (2009).
49. M. Redshaw, E. Wingfield, J. McDaniel, and E.G. Myers, Phys. Rev. Lett. **98**, 053003 (2007).
50. V.S. Kolhinen, T. Eronen, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, A. Kankainen, I.D. Moore, J. Rissanen, A. Saastamoinen, J. Suhonen, and J. Äystö, Phys. Rev. C **82**, 022501 (2010).
51. *Table of isotopes*, Ed. by R.B. Firestone, V.S. Shirley, C.M. Baglin, S.Y. Frank Chu, and J. Zipkin, Wiley-Interscience, N.Y. (1996).

Bjorken sum rule with analytic coupling at low Q^2 values

I. R. Gabdrakhmanov⁺, N. A. Gramotkov⁺, A. V. Kotikov⁺¹⁾, D. A. Volkova^{+,*}, I. A. Zemlyakov^{+,×}

⁺Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia

^{*}Dubna State University, 141980 Dubna, Russia

[×]Tomsk State University, 634010 Tomsk, Russia

Submitted 16 August 2023

Resubmitted 2 September 2023

Accepted 5 September 2023

DOI: 10.31857/S1234567823190035, EDN: yflmxc

Polarized Bjorken sum rule (BSR) $\Gamma_1^{p-n}(Q^2)$ [1, 2], i.e. the difference between the first moments of the spin-dependent structure functions (SFs) of a proton and neutron, is a very important space-like QCD observable [3, 4]. Its isovector nature facilitates its theoretical description in perturbative QCD (pQCD) in terms of the operator product expansion (OPE), compared to the corresponding SF integrals for each nucleon. Experimental results for this quantity obtained in polarized deep inelastic scattering (DIS) are currently available in a wide range of the spacelike squared momenta Q^2 : $0.021 \text{ GeV}^2 \leq Q^2 < 5 \text{ GeV}^2$ (see [5] and references therein). In particular, the most recent experimental results [5] with significantly reduced statistical uncertainties, derived mainly from the Jefferson Lab E97110 experiment on polarized protons and deuterons and E97110 one on polarized ^3H , make BSR an attractive quantity for testing various pQCD generalizations at low Q^2 values: $Q^2 \leq 1 \text{ GeV}^2$.

Theoretically, pQCD (with OPE) in the $\overline{\text{MS}}$ -scheme was the usual approach to describing such quantities. This approach, however, has the theoretical disadvantage that the running coupling constant $\alpha_s(Q^2)$ has the Landau singularities for small Q^2 values: $Q^2 \leq 0.1 \text{ GeV}^2$, which makes it inconvenient for estimating space-like observables at small Q^2 , such as BSR. contributions to the BSR [21] with good results. In the recent years, the extension of pQCD couplings for low Q^2 without Landau singularities called (fractional) analytic perturbation theory [(F)APT)] [6–13] (or the minimal analytic (MA) theory [14]), were applied to match the theoretical OPE expression with the experimental BSR data [15–23].

In the present paper the experimental data obtained for the polarized Bjorken sum rule $\Gamma_1^{p-n}(Q^2)$ for small values of Q^2 are approximated by the predictions ob-

tained in the framework of analytic QCD up to the 5th order perturbation theory, whose coupling constant does not contain the Landau pole. We found an excellent agreement between the experimental data and the predictions of analytic QCD, as well as a strong difference between these data and the results obtained in the framework of perturbative QCD.

This is an excerpt of the article “Bjorken sum rule with analytic coupling at low Q^2 values”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023602622

1. J. D. Bjorken, Phys. Rev. **148**, 1467 (1966).
2. J. D. Bjorken, Phys. Rev. D **1**, 1376 (1970)
3. A. Deur, S. J. Brodsky, and G. F. De Téramond, arXiv:1807.05250 [hep-ph].
4. S. E. Kuhn, J. P. Chen, and E. Leader, Prog. Part. Nucl. Phys. **63**, 1 (2009)
5. A. Deur, J. P. Chen, and S. E. Kuhn, et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **825**, 136878 (2022).
6. D. V. Shirkov and I. L. Solovtsov, arXiv:hep-ph/9604363 [hep-ph].
7. D. V. Shirkov and I. L. Solovtsov, Phys. Rev. Lett. **79**, 1209 (1997).
8. K. A. Milton, I. L. Solovtsov, and O. P. Solovtsova, Phys. Lett. B **415**, 104 (1997).
9. D. V. Shirkov, Theor. Math. Phys. **127**, 409 (2001).
10. Eur. Phys. J. C **22** 331 (2001).
11. A. P. Bakulev, S. V. Mikhailov, and N. G. Stefanis, Phys. Rev. D **72** 074014 (2005); Erratum: ibid. D **72**, 119908 (2005).
12. A. P. Bakulev, S. V. Mikhailov, and N. G. Stefanis, Phys. Rev. D **75**, 056005 (2007); Erratum: Phys. Rev. D **77**, 079901 (2008).
13. A. P. Bakulev, S. V. Mikhailov, and N. G. Stefanis, JHEP **06**, 085 (2010).
14. G. Cvetic and C. Valenzuela, Braz. J. Phys. **38**, 371 (2008).

¹⁾e-mail: kotikov@theor.jinr.ru

15. R. S. Pasechnik, D. V. Shirkov, and O. V. Teryaev, *Phys. Rev. D* **78**, 071902 (2008).
16. R. S. Pasechnik, D. V. Shirkov, O. V. Teryaev, O. P. Solovtsova, and V. L. Khandramai, *Phys. Rev. D* **81**, 016010 (2010).
17. A. V. Kotikov and B. G. Shaikhatdenov, *Phys. Part. Nucl.* **45**, 26 (2014).
18. V. L. Khandramai, R. S. Pasechnik, D. V. Shirkov, O. P. Solovtsova, and O. V. Teryaev, *Phys. Lett. B* **706**, 340 (2012).
19. C. Ayala, G. Cvetič, A. V. Kotikov, and B. G. Shaikhatdenov, *Int. J. Mod. Phys. A* **33**(18–19), 1850112 (2018).
20. C. Ayala, G. Cvetič, A. V. Kotikov, and B. G. Shaikhatdenov, *J. Phys. Conf. Ser.* **938**(1), 012055 (2017).
21. C. Ayala, G. Cvetič, A. V. Kotikov, and B. G. Shaikhatdenov, *Eur. Phys. J. C* **78**(12), 1002 (2018).
22. *J. Phys. Conf. Ser.* **1435**(1), 012016 (2020).
23. A. V. Kotikov and I. A. Zemlyakov, *J. Phys. G* **50**(1), 015001 (2023).

Влияние фазы несущей относительно огибающей на генерацию мультиоктавного суперконтинуума и предельно коротких импульсов в полых антирезонансных световодах

И. В. Савицкий⁺, А. А. Воронин^{+,*}, Е. А. Степанов^{+,*}, А. А. Ланин^{+,*}, А. Б. Федотов^{+,*1)}

⁺ Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^{*} Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Россия

Поступила в редакцию 12 июля 2023 г.

После переработки 22 августа 2023 г.

Принята к публикации 22 августа 2023 г.

В работе продемонстрировано влияние фазы несущей относительно огибающей на спектр суперконтинуума и характеристики предельно коротких импульсов, формируемых в результате нелинейно-оптического преобразования импульсов накачки в заполненном аргоном полем антирезонансном волноводе. Экспериментальный и теоретический анализ показывает, что в результате солитонной самокомпрессии излучения накачки с начальной центральной длиной волны около 2 мкм формируется импульс длительностью порядка одного оптического периода, спектр которого уширяется в область 400–800 нм, где наблюдается интерференция с генерируемой этим же импульсом широкополосной третьей гармоникой. Интерференционная картина оказывается чувствительной к изменению фазы несущей относительно огибающей лазерного импульса. Анализ интерференционной картины дает информацию о разности спектральных фаз солитона и третьей гармоники в спектральном диапазоне с шириной больше октавы, а также позволяет контролировать длительность формируемых в процессе солитонной самокомпрессии импульсов.

DOI: 10.31857/S1234567823190047, EDN: xukole

1. Введение. При анализе физики явлений, связанных с использованием сверхкоротких лазерных импульсов длительностью порядка одного цикла поля, нельзя оставлять без внимания влияние фазы несущей относительно огибающей (Carrier envelope phase (CEP)), которое критически важно как непосредственно при генерации предельно коротких импульсов [1–3], так и индуцируемых ими явлений: генерации высших оптических гармоник [4–6], аттосекундных [7] и терагерцовых импульсов [8], сверхбыстрой электронной динамики в твердых телах на петагерцовой частоте [9–11]. При описании физики предельно коротких импульсов, формирующихся в результате сложного сочетания нелинейно-оптических процессов таких, как фазовая самомодуляция, самоукручение заднего фронта импульса и солитонная самокомпрессия, возможно оставаться в рамках классического приближения [12, 13] и не учитывать влияние фазы несущей относительно огибающей на режимы распространения импульсов с длительностями вплоть до нескольких оптических периодов [14, 15]. Однако очевидно, что подобное при-

ближение имеет границы применимости. Например, при многооктавном уширении спектра импульсов накачки и формировании однопериодных и субпериодных импульсов в режимах экстремально высокой интенсивности [16–18] неизбежно вступают в действие зависимые от фазы несущей относительно огибающей импульса физические эффекты, такие как генерация гармоник и суммарных частот, сверхбыстрая туннельная ионизация. Эти эффекты приводят к спектральной и временной зависимости полученного импульса от фазы несущей относительно огибающей [19].

Вопрос влияния CEP лазерного импульса на генерацию суперконтинуума исследован достаточно мало. Несколько работ анализируют CEP-зависимость спектрального сверхуширения в процессе филаментации в газах и твердых телах сверхкоротких лазерных импульсов [20–23], а также при каскадной внутриимпульсной генерации разностных частот спектра на нелинейности $\chi^{(2)}$ в кристаллах [24, 25]. В нашей работе исследовано влияние фазы несущей относительно огибающей на спектр суперконтинуума, формируемого в результате солитонной самокомпрессии импульсов накачки в полем антирезонанс-

¹⁾ e-mail: a.b.fedotov@physics.msu.ru

ном волокне, заполненном аргоном. Сверхширокий спектр сжимающегося до предельно коротких длительностей солитона интерферирует с генерируемой широкополосной третьей гармоникой, покрывающей весь видимый диапазон, и эта интерференционная картина оказывается чувствительной к изменению фазы несущей относительно огибающей лазерного импульса. Интерференционная картина позволяет восстановить разность спектральных фаз полей солитона и третьей гармоники в видимом диапазоне, а также позволяет контролировать формирование импульсов с длительностью одного и менее периодов поля.

2. Методы. В экспериментах используется лазерная система [26] (рис. 1), состоящая из титан-сапфирового генератора и усилителя чирпированных импульсов, импульсы на выходе из которой (50-фс, 2.4 мДж, 810 нм) используются в качестве излучения накачки в схеме двухкаскадного оптического параметрического усилителя, на выходе из которого получаются 180-мкДж 50-фс импульсы холостой волны с центральной длиной волны около 2000 нм. Малая часть этого излучения с энергией несколько микроджоулей, контролируемой с помощью изменения его поляризации, направляется в $f - 2f$ интерферометр. Основная часть излучения проходит через оптический аттенуатор для контроля энергии излучения и фокусируется линзой из CaF_2 с фокусным расстоянием 75 мм в заполненную аргоном при давлении 4 атм газовую ячейку с сапфировыми входным и выходным окнами толщиной 2 мм, внутри которой размещен полый антирезонансный волновод длиной 20 см. Поперечная структура волновода изображена на рисунке (рис. 1) и представляет собой полую сердцевину с диаметром 70 мкм, окруженную шестью полыми капиллярами с диаметрами 36 мкм и толщиной стенок $w \approx 580$ нм, что позволяет оценить положения длин волн резонансного перемешивания мод сердцевины и оболочки

$$\lambda_k = 2w(n^2 - 1)^{1/2}/k, \quad (1)$$

где $k = 1, 2, 3, 4$, $n \approx 1.44$, $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5 \approx 1200, 600, 400, 300, 240$ нм, соответственно.

Для характеристики выходного спектра излучения изображение с выхода световода при помощи $4 - f$ систем перестраивалось на щели кремниевых и InGaAs спектрометров, имеющих рабочие диапазоны 200–1100 нм и 1000–2500 нм, соответственно. Временная форма импульса была охарактеризована с помощью интерферометрии спектральной фазы с пространственным разрешением исследуемого и опорного импульса (X-SEA-F-SPIDER) [27]. Такая система

позволяет восстановить спектральную фазу импульса в диапазоне длин волн 1000–2500 нм.

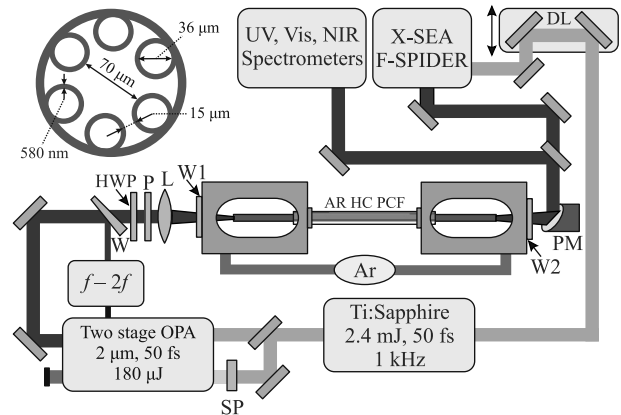


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. Ti:Sapphire – титан-сапфировая лазерная система; OPA – двухкаскадный оптический параметрический усилитель; W – клин; HWP – полуволновая пластина; P – поляризатор; L – линза из CaF_2 ; W1 и W2 – сапфировые окна газовой ячейки; Ar – аргон; AR HC PCF – антирезонансное полое фотонно-кристаллическое волокно; PM – параболическое зеркало; DL – линия задержки; X-SEA-F-SPIDER – система интерферометрии спектральной фазы с пространственным разрешением исследуемого и опорного импульса для прямого восстановления поля в ближнем ИК-диапазоне; Spectrometers – кремниевые и InGaAs спектрометры

Для измерения сдвига фазы поля относительно огибающей импульса и управления этой фазой, в работе использовался нелинейный $f - 2f$ интерферометр в схеме Маха–Цендера. Спектр суперконтинуума, сгенерированного в пластинке иттрий-алюминиевого граната толщиной 4.8 мм с помощью импульса холостой волны с энергией ≈ 7 мкДж и центральной длиной волны ≈ 2000 нм, разделяется на два плеча с помощью дихроичного зеркала с длиной волны отсечки 1500 нм. В одном из плеч помещен кристалл β -бората бария толщиной 500 мкм для генерации второй гармоники от длинноволновой части излучения. Спектральная интерференция коротковолновой части суперконтинуума и второй гармоники длинноволновой части наблюдалась в окрестности 730 нм с помощью кремниевого спектрометра. Поскольку положение пиков интерференции определяется значением CEP импульса холостой волны, можно восстановить смещение фазы, измеряя частотный сдвиг пиков.

В работе, $f - 2f$ интерферометр был соединен с помощью системы обратной связи с прецизион-

ной подвижкой (Physik Instrumente N-565), управляющей задержкой на последнем каскаде параметрического усилителя с точностью 0.5 нм и минимальным шагом 2 нм. В то время как быстрые флуктуации СЕР стабилизировались пассивно в ходе параметрического преобразования, с помощью системы с обратной связью была реализована система активной стабилизации, способная отыгрывать медленные уходы фазы (до 200 Гц). Среднеквадратичное отклонение скачков фазы холостой волны (RMS) за 100 с составило $\text{RMS} = 555$ мрад без активной стабилизации и $\text{RMS} = 106$ мрад с активной стабилизацией [26] за счет исключения медленного дрейфа СЕР. Кроме того, система с обратной связью позволяет варьировать значение СЕР в пределах нескольких периодов, что необходимо для исследования фазочувствительных эффектов.

Теоретическое исследование пространственно-временной динамики поля проведено с помощью решения обобщенного нелинейного уравнения Шредингера, записанного для комплексного мгновенного электрического поля [28, 29, 19]

$$\begin{aligned} \frac{\partial A(\omega, z)}{\partial z} &= iD(\omega)A(\omega, z) - \alpha(\omega)A(\omega, z) \\ &+ \frac{i\omega}{4c^2 n_0^2 \epsilon_0} \tilde{F} \left[3\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, -\omega_3}^{(3)} A^2(\eta, z) A^*(\eta, z) \right. \\ &\quad \left. + \chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, \omega_3}^{(3)} A^3(\eta, z) \right] \\ &- \tilde{F} \left[\frac{U_i W(I)(\rho_0 - \rho(\eta, z))A(\eta, z)}{2I} \right] \\ &- \left(\frac{i\omega_0^2 \omega}{2cn_0 \rho_c (\omega^2 + \tau_c^{-2})} + \frac{\sigma(\omega)}{2} \right) \times \\ &\quad \times \tilde{F} [\rho(\eta, z)A(\eta, z)], \end{aligned} \quad (2)$$

где $E(\eta, z) = [2cn_0\epsilon_0]^{-1/2}(A(\eta, z) + A^*(\eta, z))$ – электрическое поле, $A(\eta, z)$ – его комплексное представление, $A(\omega, z)$ – фурье образ от $A(\eta, z)$, ω – частота, η – время, z – координата распространения, $D(\omega) = \beta(\omega) - 1/v_s$ – дисперсионный оператор, v_s – скорость сопровождающей импульс системы координат, $\beta(\omega) = \omega n(\omega)/c$ – постоянная распространения, $n(\omega)$ и $\alpha(\omega)$ – эффективный показатель преломления и коэффициент потерь на вытекание моды, рассчитанные с помощью модели [30], n_0 – показатель преломления на центральной частоте лазерного импульса ω_0 , $\tilde{F}$ – оператор обратного преобразования Фурье, $\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, -\omega_3}^{(3)}$ и $\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, \omega_3}^{(3)}$ – нелинейные восприимчивости третьего порядка для процессов генерации разностной и суммарной частоты, соответственно. Модель включает учет фотоионизации, которая в нашем случае выступает в роли ограничивающе-

го фактора для наблюдения зависимых от фазы лазерного импульса спектров. Электронная плотность вычислена с помощью скоростного уравнения

$$\frac{\partial \rho}{\partial \eta} = W(I) + \frac{\sigma(\omega_0)}{U_i} \rho I, \quad (3)$$

где $I(\eta, z) = 2\Re[A(\eta, z)]^2$ – мгновенная интенсивность, $\Re[\cdot]$ – реальная часть, ρ – электронная плотность, $U_i = U_0 + U_{\text{osc}}$ – потенциал ионизации, U_{osc} – энергия индуцированного полем осциллирующего движения электрона, $W(I)$ – скорость фотоионизации, вычисленная с помощью формулы Келдыша, модифицированной Поповым–Переломовым–Терентьевым [31, 32], $\rho_c = \omega_0^2 m_e \epsilon_0 / e^2$ – критическая плотность плазмы, ρ_0 – плотность нейтральных частиц, $\sigma(\omega)$ – сечение обратного тормозного излучения, вычисленное по модели Друде $\sigma(\omega) = e^2 \tau_c [m_e \epsilon_0 n_0 c (1 + \omega^2 \tau_c^2)]^{-1}$, e и m_e – заряд и масса электрона, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная. Для расчетов распространения импульса в заполненном аргоном волноводе были взяты следующие параметры модели [28, 29]: $\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, -\omega_3}^{(3)} = \chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, \omega_3}^{(3)} = 1.8 \cdot 10^{-21} (p/p_{\text{atm}}) \text{ см}^2/\text{В}^2$, что соответствует нелинейному показателю преломления $n_2 = 3\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, -\omega_3}^{(3)} / (4c\epsilon_0 n_0^2) = 1.7 \cdot 10^{-19} (p/p_{\text{atm}}) \text{ см}^2/\text{Вт}$, $U_0 = 15.76 \text{ эВ}$, $\tau_c = 190 (p_{\text{atm}}/p) \text{ фс}$, где p – давление, а p_{atm} – атмосферное давление.

3. Результаты и дискуссия. При распространении по заполненному аргоном при давлении 4 атм волноводу лазерного импульса с центральной длиной волны 2-мкм, энергией 19.5-мкДж и длительностью 50-фс, наблюдается солитонная самокомпрессия вследствие совместного действия аномальной дисперсии волновода с аргоном и керровской нелинейности, в результате чего спектр импульса расширяется и охватывает диапазон от 200 до 2500 нм шириной более 3.5 октав (рис. 2), проходя через несколько резонансов волноводной структуры вблизи длин волн 1200, 600, 400, 300, 240 нм (серые вертикальные полосы на рис. 2). В коротковолновой области уширение спектра ограничено передачей энергии в дисперсионные волны из-за фазового согласования солитона и дисперсионных волн (пик на длине волны 240 нм на рис. 2).

Полученный в результате солитонной самокомпрессии суперконтинуум на выходе волокна периодически зависит от фазы несущей относительно огибающей лазерного импульса с периодом π (рис. 3). Такая периодичность свидетельствует о интерференции когерентного синего крыла суперконтинуума и третьей гармоники, генерируемой длинноволновой

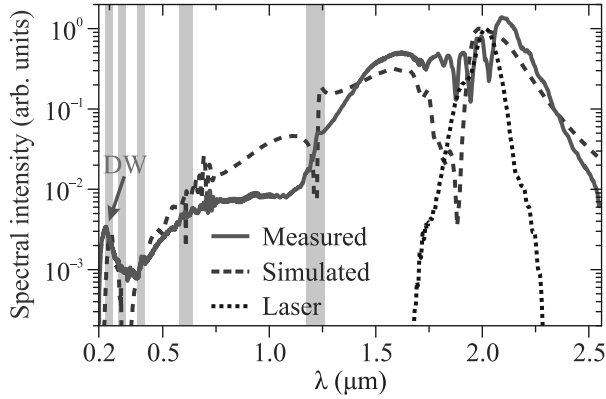


Рис. 2. (Цветной онлайн) Типичный измеренный (сплошная кривая) и расчетный (штриховая кривая) суперконтинуум на выходе антирезонансного волокна, заполненного аргонном при давлении 4 атм, возникающий при распространении по нему 19.5-мкДж 50-фс лазерного импульса со спектром, показанным пунктирной кривой. Вертикальные серые полосы показывают области резонансов волноводной структуры, DW – пик в спектре на длине волны фазового согласования дисперсионных волн

частью солитона. Действительно, если спектральную амплитуду и спектральную фазу солитона обозначить A_{sol} и $\phi_{\text{sol}}(\omega)$, соответственно, а спектральную амплитуду и спектральную фазу третьей гармоники обозначить A_{THG} и $\phi_{\text{THG}}(\omega)$, соответственно, то наблюдаемая спектральная интерференция полей будет иметь вид:

$$\begin{aligned} S(\omega, \psi_{\text{CEP}}) &= |A_{\text{sol}}(\omega) \exp[i\phi_{\text{sol}}(\omega)] \\ &+ A_{\text{THG}}(\omega) \exp[i\phi_{\text{THG}}(\omega)]|^2 = \\ &= |A_{\text{sol}}(\omega)|^2 + |A_{\text{THG}}(\omega)|^2 \\ &+ A_{\text{sol}} A_{\text{THG}}^* \exp[i\phi_{\text{sol}}(\omega) - i\phi_{\text{THG}}(\omega)] \\ &+ A_{\text{sol}}^* A_{\text{THG}} \exp[i\phi_{\text{THG}}(\omega) - i\phi_{\text{sol}}(\omega)]. \end{aligned} \quad (4)$$

Вводя интенсивности этих полей $I_{\text{sol}}(\omega) = |A_{\text{sol}}(\omega)|^2$ и $I_{\text{THG}}(\omega) = |A_{\text{THG}}(\omega)|^2$, получим что

$$\begin{aligned} S(\omega, \psi_{\text{CEP}}) &= I_{\text{sol}}(\omega) + I_{\text{THG}}(\omega) \\ &+ 2(I_{\text{sol}}(\omega) I_{\text{THG}}(\omega))^{1/2} \cos[\phi_{\text{sol}}(\omega) - \phi_{\text{THG}}(\omega)], \end{aligned} \quad (5)$$

т.е. интерференционная картина определяется интенсивностями компонент и разностью их фаз. Если фазу солитона представить в виде $\phi_{\text{sol}}(\omega) \approx \psi_{\text{sol}}(\omega) + \psi_{\text{CEP}}$, где ψ_{CEP} – фаза несущей относительно огибающей, а $\psi_{\text{sol}}(\omega)$ – не зависящая от ψ_{CEP} , приобретенная в результате действия независимых от ψ_{CEP} эффектов спектральная фаза солитона, а фазу третьей гармоники солитона представить в виде

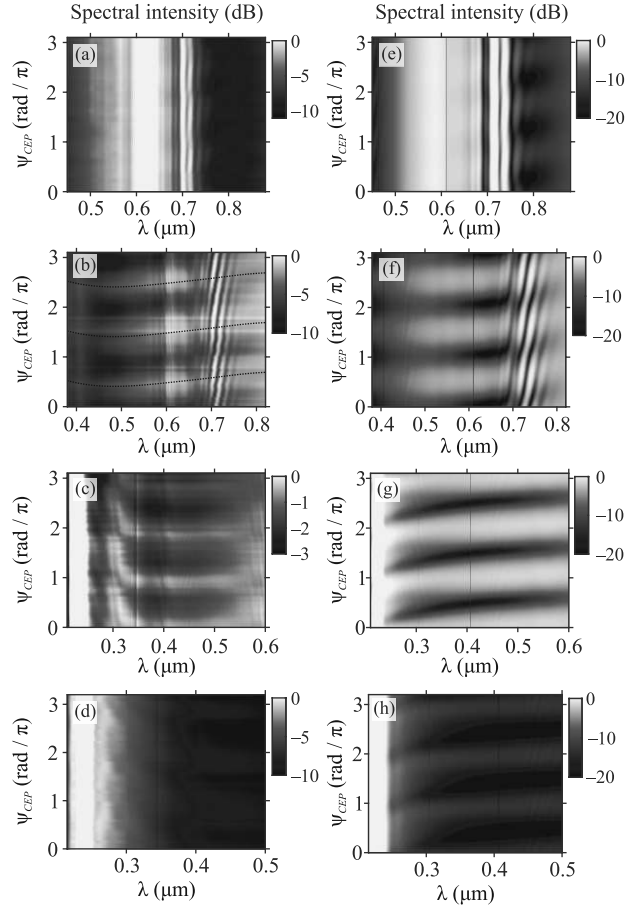


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости измеренных (a)–(d) и расчетных (e)–(h) спектров на выходе полого антирезонансного волокна от фазы несущей относительно огибающей (CEP) лазерного импульса при его энергии: (a), (e) – 18.5 мкДж; (b), (f) – 19.5 мкДж; (c), (g) – 21.0 мкДж; (d), (h) – 22.0 мкДж. На панели (b) штриховыми кривыми показан аппроксимированный спектральный профиль разности фаз $\psi_{\text{dif}}/2 + \pi n$, где n – целое число

$\phi_{\text{THG}}(\omega) \approx \psi_{\text{THG}}(\omega) + 3\psi_{\text{CEP}}$, где $\psi_{\text{THG}}(\omega)$ – независимая от ψ_{CEP} ее часть, то спектральная интерференция полей примет вид

$$\begin{aligned} S(\omega, \psi_{\text{CEP}}) &= I_{\text{sol}}(\omega) + I_{\text{THG}}(\omega) \\ &+ 2(I_{\text{sol}}(\omega) I_{\text{THG}}(\omega))^{1/2} \times \\ &\times \cos[\psi_{\text{sol}}(\omega) - \psi_{\text{THG}}(\omega) - 2\psi_{\text{CEP}}]. \end{aligned} \quad (6)$$

Как видно из уравнения (6), интерференционная картина солитона и его третьей гармоники имеет период в 2 раза меньше, чем период ψ_{CEP} , т.е. π радиан, что совпадает с периодом интерференции на рис. 3. Кроме того линии максимумов конструктивной интерференции на этих картах определяются равенством $\psi_{\text{dif}}(\omega) - 2\psi_{\text{CEP}} = 2\pi l$, где

$\psi_{\text{dif}}(\omega) = \psi_{\text{sol}}(\omega) - \psi_{\text{THG}}(\omega)$, а l – целые числа, таким образом, аппроксимируя положения максимумов полос на картах рис. 3, можно определить разность фаз $\psi_{\text{dif}}(\omega)$ солитона и его третьей гармоники (рис. 3b, 4b).

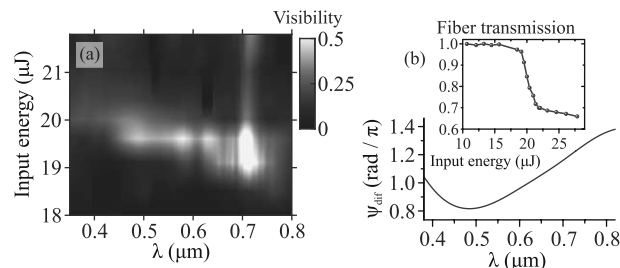


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости видности измеренных интерференционных карт, часть которых показана на рис. 3a–d, от входной энергии импульса. (b) – Спектральный профиль разности фаз ψ_{dif} , аппроксимированный из рис. 3b. На вкладке показана зависимость коэффициента пропускания волокна от входной энергии импульса

Разность фаз $\psi_{\text{dif}}(\omega)$ важна для характеристики спектральной фазы суперконтинуума в видимом диапазоне. Как будет показано позже, расчеты предсказывают субпериодную длительность выходного импульса, однако экспериментальная характеристика настолько коротких импульсов является очень сложной задачей. В нашей работе характеристика спектральной фазы импульса произведена методом X-SEA-F-SPIDER в спектральном диапазоне 1–2.5 мкм. Спектральную фазу суперконтинуума в диапазоне < 1 мкм измерить сложно, традиционно в методах восстановления спектральной фазы в широкополосном диапазоне мешают дисперсионные эффекты в окнах камеры и толще нелинейных кристаллов. Определяемая в работе разность фаз $\psi_{\text{dif}}(\omega)$ свободна от этих дисперсионных ограничений, так как третья гармоника генерируется на последнем сантиметре распространения импульса по волноводу и до выходного окна камеры. Если сделать предположение относительно фазы третьей гармоники, из $\psi_{\text{dif}}(\omega)$ можно определить спектральную фазу солитона в видимом диапазоне на выходе из волокна, дополняющую экспериментальное измерение длительности предельно короткого импульса.

Исследуя зависимости спектров от фазы несущей относительно огибающей при различных энергиях лазерного импульса видим, что при энергии 18.5 мкДж (рис. 3a, e) спектр солитона еще не достигает области третьей гармоники, поэтому их интерференция видна лишь в длинноволновой части тре-

тей гармонике на длинах волн 730–870 нм. Оптимальная энергия, дающая октавный диапазон интерференции полей, составляет 19.5 мкДж (рис. 3b, f). Помимо широкополосной интерференции на этих картах видна еще узкополосная интерферирующая компонента вблизи 710 нм, ее наличие связано с генерацией третьей гармоники на начальном этапе солитонной самокомпрессии [33], когда еще нет быстрого уширения спектра импульса (рис. 5c). Прак-

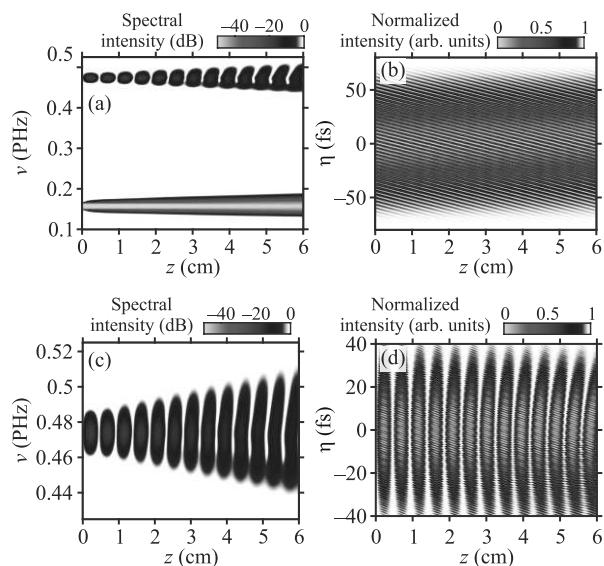


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a), (b) – Расчетная динамика спектра (a) и временного профиля поля (b) на начальном этапе распространения импульса. (c), (d) – Фурье-анализ карт (a), (b): спектр и временной профиль вырезанной фурье-фильтром с полосой пропускания от 0.37 до 0.9 ПГц компоненты третьей гармоники из расчетов, представленных на панелях (a), (b)

тически вертикальные полосы интерференции широкополосной третьей гармоники свидетельствуют о незначительной частотной модуляции (чирпа) сжатого солитона и генерируемой им в конце волокна поля широкополосной третьей гармоники. Наклонные полосы узкополосной третьей гармоники вблизи длины волны 710 нм наоборот показывают ее частотную модуляцию, накопленную при распространении по волокну. При дальнейшем увеличении энергии до 21 и 22 мкДж (рис. 3c, d, g, h) увеличивается спектральная интенсивность коротковолновых компонент спектра и в конечном итоге энергия солитона частично уходит в энергию дисперсионных волн в диапазоне 200–300 нм (рис. 3d), на которых спектр теряет зависимость от фазы несущей относительно огибающей лазерного импульса.

Дисперсионные волны, хорошо видимые на рис. 3d и h на длинах волн менее 300 нм, сгенерированы солитоном на нелинейности $\chi_{\omega:\omega_1,\omega_2,-\omega_3}^{(3)}$, поэтому их спектр не имеет зависимости от фазы несущей относительно огибающей.

На рисунке 4 представлена зависимость видности V интерференционной картины на картах, подобных рис. 3a–d, от входной энергии импульса,

$$V(\lambda) = \frac{I_{\max}(\lambda) - I_{\min}(\lambda)}{I_{\max}(\lambda) + I_{\min}(\lambda)}, \quad (7)$$

где

$$I_{\max}(\lambda) = \max_{\psi_{CEP}} I(\psi_{CEP}, \lambda), \quad (8)$$

$$I_{\min}(\lambda) = \min_{\psi_{CEP}} I(\psi_{CEP}, \lambda). \quad (9)$$

Из этой карты видно, что зависимость спектра выходного излучения от фазы ψ_{CEP} начинает проявляться при энергии > 18 мкДж на длинах волн 0.7–0.8 мкм, куда начинает дотягиваться синее крыло солитонного спектра. При увеличении энергии спектр солитона уширяется в видимую область, и при энергии около 19.5 мкДж наблюдается широкополосная интерференция во всем видимом диапазоне. При такой энергии пропускание волокна достигает 95 % (рис. 4b). При больших энергиях длина волокна перестает соответствовать оптимальной длине самокомпрессии импульса, в результате чего спектральная интенсивность суперконтинуума на выходе волокна падает в видимом диапазоне и видность широкополосной интерференции спектров солитона и генерируемой им третьей гармоники уменьшается (рис. 4a). В этом случае остается только область интерференции вблизи длины волны 710 нм, в которой генерируется классическая узкополосная третья гармоника на всем рассматриваемом диапазоне энергий начального импульса.

Решение уравнения распространения (2) лазерного импульса по волноводу на начальном этапе (рис. 5) демонстрирует классический сценарий генерации третьей гармоники в условиях значительной фазовой расстройки. Длина когерентности, определенная как

$$L_{THG} = \pi / |\Delta\beta(\omega_p)|, \quad (10)$$

где фазовая расстройка

$$\Delta\beta(\omega_p) = 3\beta(\omega_p) + 3n_2 I \omega / c - \beta(3\omega_p) \quad (11)$$

на длине волны $\lambda_p = 2\pi c / \omega_p = 2$ мкм при низких интенсивностях составляет около $L_{THG} \approx 2.5$ мм, это расстояние совпадает с половиной расстояния между пиками вертикальных полос третьей гармоники на

рис. 5c, d. Эта компонента третьей гармоники узкополосная, ее спектр простирается от 400 до 500 ТГц (рис. 5c, 6a, 6b). Фазовая расстройка третьей гармоники имеет заметную частотную зависимость, такую, что уже на расстоянии $z = 6$ см синее и красное крыло спектра гармоники на частотах 505 и 445 ТГц генерируются в противофазе (рис. 5c). Поэтому на значительной длине распространения при $z \approx 18$ см полосы сигнала узкополосной третьей гармоники на рис. 6b имеют сильный наклон, а сама гармоника накапливает в процессе распространения по волноводу частотную модуляцию (чирп).

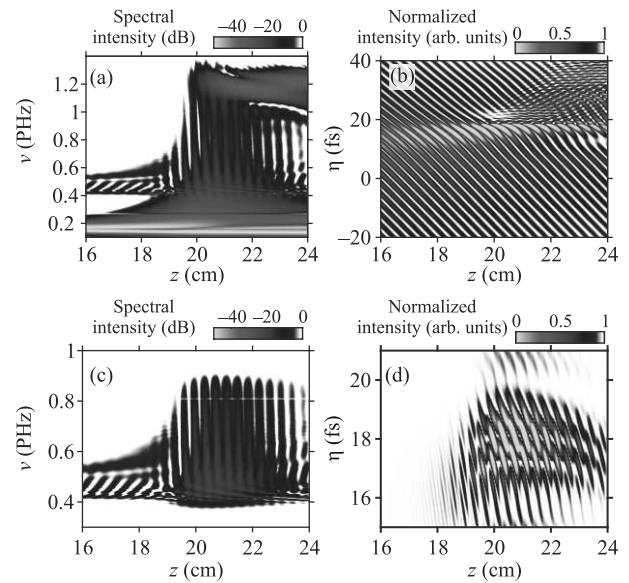


Рис. 6. (Цветной онлайн) (a), (b) – Расчетная динамика спектра (a) и временного профиля поля (b) на финальном этапе распространения импульса. (c), (d) – Фурье-анализ карт (a, b): спектр и временной профиль вырезанной фурье-фильтром с полосой пропускания от 0.37 до 0.9 ПГц компоненты третьей гармоники из расчетов, представленных на панелях (a), (b)

На финальном этапе расчета распространения лазерного импульса по волноводу (рис. 6) за счет солитонной самокомпрессии интенсивность сжимающегося пика импульса резко увеличивается до 100 ТВт/см², вызывая мощную широкополосную генерацию третьей гармоники с шириной спектра более октавы (рис. 6a, c), от 400 до 900 ТГц. Во временном представлении сжатый импульс имеет крутой задний фронт из-за эффекта самоукручения, а фурье-анализ широкополосной третьей гармоники показывает, что она генерируется в виде предельно короткого импульса. Максимально широкий спектр гармоники наблюдается при $z = 20.3$ см, т.е. на первом сантиметре широкополосной генерации третьей

гармоники. Далее часть излучения солитона переходит в дисперсионную волну, отчетливо видимую при $z > 20$ см на частоте 1.2 ПГц (рис. 6а), а также наблюдаемую как интерференция при $20 \text{ фс} < \eta < 40 \text{ фс}$ на рис. 6б.

На рисунке 7 представлены временные профили сжатого импульса. Измеренный с помощью си-

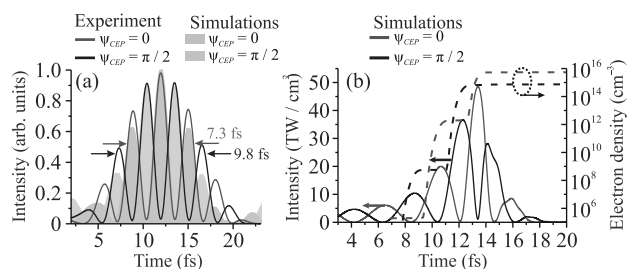


Рис. 7. (Цветной онлайн) (а) – Измеренная форма поля сжатого импульса с помощью системы разрешенной по пространству интерферометрии спектральной фазы исследуемого и опорного импульса X-SEA-F-SPIDER (сплошные линии) при двух значениях фазы ψ_{CEP} . Заливкой показан временной профиль расчетного импульса при $z = 20.3$ см, отфильтрованного после расчета Фурье-фильтром с полосой пропускания 1.0–2.5 мкм. (б) – Неотфильтрованный временной профиль расчетного импульса (по левой шкале) и временной профиль генерируемой им электронной плотности (по правой шкале)

стемы X-SEA-F-SPIDER профиль импульса имеет длительность 7.3 и 9.8 фс при фазе $\psi_{\text{CEP}} = 0$ и $\pi/2$, соответственно. Эти длительности соответствуют 1.1 и 1.5 оптического периода на центральной длине волны измеряемого спектра 1920 нм. Реализованная в наших экспериментах система X-SEA-F-SPIDER имеет ограниченный рабочий спектральный диапазон 1.0–2.5 мкм, что накладывает соответствующие ограничения и на измеряемую длительность импульсов. Для сравнения с экспериментом у расчетного поля был выделен тот же спектральный диапазон с помощью полосового Фурье-фильтра. В этом случае результаты расчета длительностей импульсов для отфильтрованного поля неплохо совпадают с измеренным и представлены заливкой на рис. 7а. При использовании полной спектральной ширины сжатого импульса без фильтрации расчеты предсказывают формирование предельно короткого импульса с длительностью 1.2 и 3.5 фс при фазе $\psi_{\text{CEP}} = 0$ и $\pi/2$, соответственно, что предполагает длительности импульсов менее полупериода поля. Однако, для экспериментального подтверждения этого результата вычислений необходимо пользоваться другими методиками измерений, выходящи-

ми за рамки данной работы. На рисунке 7 показана максимальная интенсивность сжатого импульса на выходе волокна и временной профиль электронной плотности, генерируемой импульсом такой интенсивности. Максимальная интенсивность составляет $I_m \approx 50 \text{ ТВт/см}^2$, что соответствует керровской добавке к показателю преломления $\delta n_k = n_2 I_m \approx 3.5 \cdot 10^{-5}$. Максимальная электронная плотность при этом составляет $\rho_m \approx 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, что соответствует плазменной добавке к показателю преломления $\delta n_p = \rho_m / \rho_c \approx 1.3 \cdot 10^{-5}$, где $\rho_c \approx 2.8 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ – критическая электронная плотность на длине волны 2 мкм. Керровская добавка δn_k доминирует над плазменной δn_p даже при максимальной интенсивности распространяющегося импульса, это объясняет незначительную роль плазменных эффектов в данной работе.

Для демонстрации этих оценок на рис. 8 показаны зависимости выходных спектров от фазы ψ_{CEP} и динамика спектров при распространении импульса по волокну, рассчитанные по трем моделям: (i) с отключенной ионизацией и генерацией суммарной частоты, (ii) с отключенной ионизацией и включенной генерацией суммарной частоты и (iii) с включенной ионизацией и генерацией суммарной частоты. Сравнение результатов показывает, что при энергии импульса 19.5 мкДж ионизация еще слабо влияет на спектры импульса, а зависимости от фазы несущей относительно огибающей уже хорошо видны. Также видно, что при отключении генерации суммарной частоты суперконтинуум по-прежнему генерируется, но зависимости от фазы несущей относительно огибающей совсем пропадают, так как в этом случае нет одного из интерферирующих полей.

4. Заключение. Таким образом показано влияние фазы несущей относительно огибающей на спектр суперконтинуума и характеристики предельно коротких импульсов, формируемых в результате нелинейно-оптического преобразования импульсов накачки в заполненном аргоном полом антирезонансном волокне. Экспериментальный и теоретический анализ показывает, что в результате солитонной самокомпрессии импульсов накачки с начальной центральной длиной волны около 2 мкм формируется импульс длительностью порядка одного оптического периода, спектр которого уширяется в область 400–800 нм, где наблюдается интерференция с генерируемой этим же импульсом широкополосной третьей гармоникой. Интерференционная картина оказывается чувствительной к изменению фазы несущей относительно огибающей лазерного импульса. Анализ интерференционной картины дает информа-

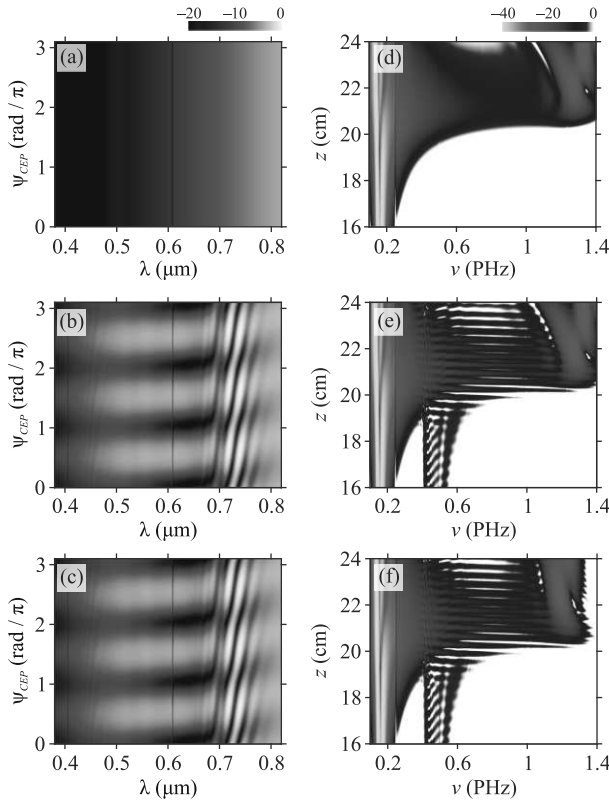


Рис. 8. (Цветной онлайн) Зависимость спектров на выходе (при $z = 20$ см) полого антирезонансного волокна от фазы несущей относительно огибающей (a)–(c) и динамика спектра импульса при его распространении по волноводу (d)–(f). На панелях (a), (d) показан расчет по модели (2), в которой отключена ионизация и генерация суммарных частот ($\rho = 0$, $W = 0$, $\chi_{\omega:\omega_1, \omega_2, \omega_3}^{(3)} = 0$). На панелях (b), (e) показан расчет по модели (2), в которой отключена ионизация ($\rho = 0$, $W = 0$). На панелях (c), (f) показан расчет по модели (2), в которой включены все слагаемые. Энергия лазерного импульса 19.5 мкДж

цию о разности спектральных фаз солитона и третьей гармоники в спектральном диапазоне с шириной больше октавы, а также позволяет контролировать длительность формируемых в процессе солитонной самокомпрессии импульсов. Экспериментально измеренная методикой X-SEA-F-SPIDER минимальная длительность сжатого импульса составила 7.3 фс, т.е. 1.1 оптического периода на центральной длине волны его спектра 1920 нм. Хотя ограничения, накладываемые экспериментальной методикой не позволяют измерить меньшую длительность импульсов, представленный теоретический анализ позволяет говорить о возможном формировании импульсов с длительностью менее половины периода поля.

Авторы выражают глубокую благодарность профессору А. М. Желтикову за всестороннюю поддержку.

Работа поддержана Российским научным фондом (22-12-00149, исследования в области фазового управления спектром, 22-72-10044, исследования в области измерения коротких импульсов, 19-72-10054, исследования в области увеличения мощности импульсов); И. В. Савицкий благодарит фонд “Базис” (# 22-2-2-4-1).

1. A. Wirth, M. T. Hassan, I. Grguraš, J. Gagnon, A. Moulet, T. T. Luu, S. Pabst, R. Santra, Z. A. Alahmed, A. M. Azzeer, V. S. Yakovlev, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Science* **334**, 195 (2011).
2. S.-W. Huang, G. Cirimi, J. Moses, K.-H. Hong, S. Bhardwaj, J. R. Birge, L.-J. Chen, E. Li, B. J. Eggleton, and G. Cerullo, *Nat. Photonics* **5**, 475 (2011).
3. E. Ridente, M. Mamaikin, N. Altwaijry, D. Zimin, M. F. Kling, V. Pervak, M. Weidman, F. Krausz, and N. Karpowicz, *Nat. Commun.* **13**, 1111 (2022).
4. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nat. Phys.* **3**, 381 (2007).
5. G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thiré, B. E. Schmidt, F. Légaré, C. R. McDonald, T. Brabec, and P. B. Corkum, *Nature* **522**, 462 (2015).
6. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Lange, B. Urbanek, C. Lange, U. Huttner, D. Golde, T. Meier, M. Kira, S. W. Koch, and R. Huber, *Nat. Photonics* **8**, 119 (2014).
7. A. Baltuška, T. Udem, M. Uiberacker, M. Hentschel, E. Goulielmakis, C. Gohle, R. Holzwarth, V. S. Yakovlev, A. Scrinzi, and T. W. Hänsch, *Nature* **421**, 611 (2003).
8. M. Kreß, T. Löffler, M. D. Thomson, R. Dörner, H. Gimpel, K. Zrost, T. Ergler, R. Moshhammer, U. Morgner, J. Ullrich, and H. G. Roskos, *Nat. Phys.* **2**, 327 (2006).
9. A. Schiffrin, T. Paasch-Colberg, N. Karpowicz, V. Apalkov, D. Gerster, S. Mühlbrandt, M. Korbman, J. Reichert, M. Schultze, S. Holzner, J. V. Barth, R. Kienberger, R. Ernstorfer, V. S. Yakovlev, M. I. Stockman, and F. Krausz, *Nature* **493**, 70 (2013).
10. F. Krausz and M. I. Stockman, *Nat. Photonics* **8**, 205 (2014).
11. M. Lucchini, S. A. Sato, A. Ludwig, J. Herrmann, M. Volkov, L. Kasmi, Y. Shinohara, K. Yabana, L. Gallmann, and U. Keller, *Science* **353**, 916 (2016).
12. G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, fifth edition, Academic Press, N.Y. (2013).
13. С. А. Ахманов, В. А. Выслоух, А. С. Чиркин, *Оптика фемтосекундных лазерных импульсов*, Наука, М. (1988).

14. T. Brabec and F. Krausz, Phys. Rev. Lett. **78**, 3282 (1997).
15. T. Brabec and F. Krausz, Rev. Mod. Phys. **72**, 545 (2000).
16. T. Balciunas, C. Fourcade-Dutin, G. Fan, T. Witting, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, F. Gerome, G. G. Paulus, A. Baltuska, and F. Benabid, Nat. Commun. **6**, 6117 (2015).
17. U. Elu, M. Baudisch, H. Pires, F. Tani, M. H. Frosz, F. Köttig, A. Ermolov, P. St. J. Russell, and J. Biegert, Optica **4**, 1024 (2017).
18. E. A. Stepanov, A. A. Voronin, F. Meng, A. V. Mitrofanov, D. A. Sidorov-Biryukov, M. V. Rozhko, P. B. Glek, Y. Li, A. B. Fedotov, A. Pugžlys, A. Baltuška, B. Liu, S. Gao, Y. Wang, P. Wang, M. Hu, and A. M. Zheltikov, Phys. Rev. A **99**, 033855 (2019).
19. A. A. Voronin and A. M. Zheltikov, Phys. Rev. A **90**, 043807 (2014).
20. L. Bergé, C.-L. Soulez, C. Köhler, and S. Skupin, Appl. Phys. B **103**, 563 (2011).
21. C. Gong, J. Jiang, C. Li, L. Song, Z. Zeng, Y. Zheng, J. Miao, X. Ge, Y. Deng, and R. Li, Opt. Express **21**, 24120 (2013).
22. Y. Zhong, H. Diao, Z. Zeng, Y. Zheng, X. Ge, R. Li, and Z. Xu, Opt. Express **22**, 29170 (2014).
23. E. Zaloznaya, V. Kompanets, A. Savvin, A. Dormidonov, S. Chekalin, and V. Kandidov, Laser. Phys. Lett. **19**, 075402 (2022).
24. P. Steinleitner, N. Nagl, M. Kowalczyk, J. Zhang, V. Pervak, C. Hofer, A. Hudzikowski, J. Sotor, A. Weigel, F. Krausz, and K. F. Mak, Nat. Photonics **16**, 512 (2022).
25. A. J. Lind, A. Kowligy, H. Timmers, F. C. Cruz, N. Nader, M. C. Silfies, T. K. Allison, and S. A. Diddams, Phys. Rev. Lett. **124**, 133904 (2020).
26. I. V. Savitsky, E. A. Stepanov, A. A. Lanin, A. B. Fedotov, and A. M. Zheltikov, ACS Photonics **9**, 1679 (2022).
27. G. Fan, T. Balčiūnas, C. Fourcade-Dutin, S. Haessler, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, F. Gérôme, F. Benabid, A. Baltuška, and T. Witting, Opt. Express **24**, 12713 (2016).
28. L. Berge, S. Skupin, R. Nuter, J. Kasparian, and J.-P. Wolf, Rep. Prog. Phys. **70**, 1633 (2007).
29. A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. **441**, 47 (2007).
30. M. Zeisberger and M. A. Schmidt, Sci. Rep. **7**, 11761 (2017).
31. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1965).
32. А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, ЖЭТФ **50**, 1393 (1966).
33. И. В. Савицкий, Е. А. Степанов, А. А. Ланин, А. Б. Федотов, Письма в ЖЭТФ **117**, 285 (2023).

Управление угловой расходимостью терагерцового излучения, генерируемого при одноцветной филаментации, с помощью фазовых оптических элементов

Д. В. Пушкарев⁺, Г. Э. Ризаев⁺, О. Г. Косарева^{+,*}, Л. В. Селезнев^{+,1)}

⁺ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^{*} Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 сентября 2023 г.

После переработки 7 сентября 2023 г.

Принята к публикации 7 сентября 2023 г.

Приводятся экспериментально полученные двумерные распределения терагерцового излучения, генерация которого осуществляется одним и четырьмя филаментами, формируемыми фазовыми оптическими элементами. Продemonстрировано, что применение фазовой маски примерно в полтора раза уменьшает углы распространения терагерцового пучка, что обусловлено интерференцией терагерцового излучения от четырех источников. Применение решетки Дамманна эти углы несколько увеличивает.

DOI: 10.31857/S1234567823190059, EDN: xsyptw

1. Введение. В течение последних двух десятилетий задачи генерации и детектирования излучения терагерцового диапазона (~ 0.1 – 10 ТГц) остаются одной из весьма актуальных тем в лазерной физике и нелинейной оптике [1–3]. Одним из источников терагерцового излучения, предложенных за эти годы, является плазма, формирующаяся при филаментации фемтосекундного лазерного излучения в воздухе [4, 5]. В случае одноцветной филаментации диаграмма направленности такого источника представляет собой полый конус, угол раствора которого определяется соотношением $\theta \sim \sqrt{\lambda_{\text{THz}}/L}$, где λ_{THz} – длина волны терагерцового излучения, L – длина плазменного канала филамента [5–7]. В некоторых случаях распределение терагерцового излучения в плоскости, перпендикулярной направлению распространения лазерного импульса, может иметь сильную модуляцию [8], либо представлять собой два максимума, расположенных на оси, перпендикулярной плоскости поляризации лазерного излучения [9–11], при этом на оси распространения излучения также наблюдается минимум терагерцового сигнала. Отмечалось, что эффективность генерации терагерцового излучения в одноцветном филаменте существенно возрастает при увеличении числовой апертуры пучка (жесткости фокусировки), при этом угол раствора конуса возрастает и может достигать 120° , и при угле 90° от оси наблюдается значимый ненулевой терагерцовый сигнал [12]. Очевидно, что диагностировать и рабо-

тать со столь расходящимся терагерцовым пучком весьма затруднительно. Поэтому появился ряд работ, где авторы попытались уменьшить расходимость терагерцового пучка. Например, в работе [13] с помощью численного моделирования было показано, что интерференция сигналов от нескольких филаментов, формирующихся со сдвигом по времени, может дать один узкий максимум, направленный под углом к оси. Однако внесение необходимых временных сдвигов для большого массива филаментов представляет собой довольно сложную экспериментальную задачу. В более поздней работе [14] также с помощью компьютерного моделирования было показано, что конус, в который распространяется терагерцовое излучение, можно многократно сузить, если создать регулярный массив филаментов с периодом, равным длине волны терагерцового излучения, повысив тем самым яркость терагерцового источника.

Цель нашей работы – экспериментально продемонстрировать возможность изменения диаграммы направленности терагерцового излучения, генерируемого при одноцветной филаментации, путем создания упорядоченного массива филаментов с помощью дифракционных оптических элементов.

2. Методика эксперимента. В экспериментах использовалось излучение лазерной системы на Ti:Sa, генерирующей импульсы длительностью 100 фс с центральной длиной волны 750 нм, диаметр пучка составлял 8 мм по уровню $1/e$. Поляризация лазерного излучения лежала в горизонтальной плоскости. После компрессора фазовая маска делила ла-

¹⁾ e-mail: seleznev@lebedev.ru

зерный пучок на четыре равных части с фазой соседних частей, смещенной на π . Такая маска формирует в дальней зоне эрмит-гауссову моду TEM_{11} [15]. При мощности в каждом из максимумов, в несколько раз превышающих критическую мощность самофокусировки, такая маска создает массив из 4 филаментов, не сливающихся друг с другом даже вблизи фокуса при использовании дополнительной фокусировки [16]. В экспериментах также применялась решетка Дамманна, которая, как и фазовая маска, в дальней зоне образовывала четыре равноинтенсивных максимума в вершинах квадрата. Как было продемонстрировано в работе [17], этот фазовый элемент также создает структуру из 4 филаментов, стабильную в широком диапазоне мощности лазерного импульса. Кроме того, проводились эксперименты с гауссовым пучком, т.е. без фазовых элементов, который образовывал одиночный максимум. Энергия лазерного импульса в гауссовом пучке составляла 1.5 мДж, а в случае наличия фазовых элементов – 6 мДж. Таким образом на каждый максимум приходилось 1.5 мДж, что соответствовало примерно 5-кратному превышению над критической мощностью самофокусировки. После прохождения фазовых элементов (или без них) лазерный пучок фокусировался сферическим зеркалом с фокусным расстоянием 1 или 0.5 м. При фокусном расстоянии 0.5 м использование фазовой маски приводило к возникновению четырех филаментов с расстоянием между ними в фокальной плоскости около 50 мкм, для решетки Дамманна соответствующее расстояние составляло около 250 мкм. Применение зеркала с фокусным расстоянием 1 м приводило к двукратному увеличению расстояния между филаментами. Расстояние определялось по боковому изображению плазменных каналов, полученному с помощью объектива и ПЗС матрицы. Образующаяся в результате самофокусировки и ионизации воздуха плазма являлась источником терагерцового излучения. Терагерцовое излучение регистрировалось сверхпроводниковым NbN болометром на горячих электронах (“Сконтел”). Перед болометром располагался узкополосный фильтр с максимумом пропускания около 85 % на частоте 1 ТГц со спектральной шириной 0.17 ТГц. Применение подобного фильтра было необходимо, поскольку различные терагерцовые частоты распространяются под разными углами [18], а в случае регистрации широкополосного сигнала изменения угла распространения могут “замываться” [7]. В экспериментах применялась оптическая схема, аналогичная [11], позволяющая получать двумерное распределение терагерцового излучения. Болометр находился на расстоянии

около 40 см от положения фокуса сферического зеркала. Горизонтальное распределение терагерцового излучения измерялось с помощью поворота болометра в горизонтальной плоскости вокруг точки фокуса. Затем ось распространения лазерного излучения поворачивалась путем перемещения и юстировки сферического зеркала в вертикальной плоскости. Положение точки фокуса при этом фиксировалось. Для каждого угла наклона оптической оси в эксперименте измерялось распределение терагерцового излучения в горизонтальной плоскости. В результате пошагово получалось двумерное (растровое) распределение терагерцового излучения.

3. Результаты эксперимента. В экспериментах при фокусировке лазерного излучения зеркалом с фокусным расстоянием 1 м были получены двумерные распределения терагерцового излучения, генерируемого в плазме при одноцветной филаментации гауссового пучка, гауссового пучка с применением фазовой маски и решетки Дамманна (рис. а–с, соответственно). Как и в более ранних работах [9–11] при филаментации гауссового пучка структура терагерцового пучка на частоте 1 ТГц представляла из себя два ярко выраженных максимума, лежащих на оси, перпендикулярной поляризации лазерного излучения (рис. 1а).

Применение фазовых элементов (фазовой маски и решетки Дамманна) не приводило к изменению характера распределения терагерцового излучения: также наблюдались два максимума на вертикальной оси. Однако применение фазовой маски существенно (примерно в полтора раза) уменьшало углы распространения терагерцового излучения (рис. 1б). Повидимому, это связано с интерференцией терагерцового излучения, что численно было показано в работе [14]. В случае применения решетки Дамманна углы распространения терагерцового излучения наоборот несколько увеличивались (рис. 1с). В этом случае после решетки пучок разбивается не на четыре, а на множество суб-пучков, которые в дальней зоне формируют четыре локальных максимума. Таким образом, эффективная числовая апертура соответствует исходному гауссову пучку (суб-пучки сходятся из различных областей исходного пучка). Однако при фокусировке и распространении гауссового пучка происходит набег фазы за счет керровской нелинейности и самофокусировки. Тогда как каждый из множества суб-пучков имеет относительно небольшую мощность, и керровская нелинейность начинает действовать, только когда суб-пучки уже в значительной мере сложились в пространстве, т.е. вблизи перетяжки [17]. За счет такого сложения само-

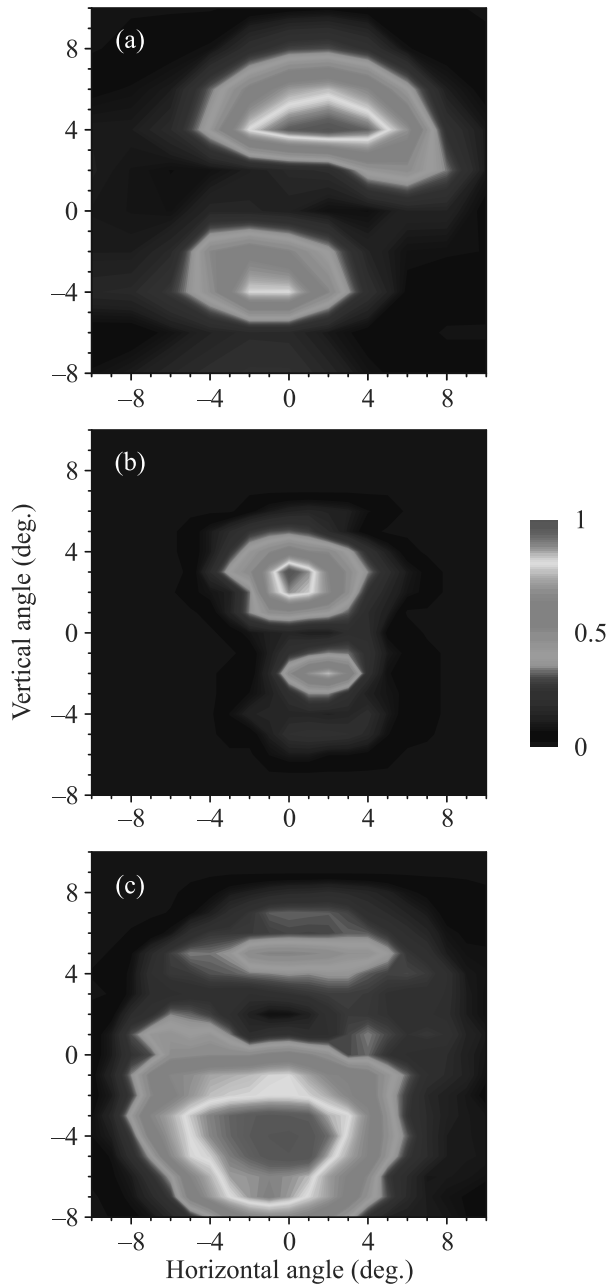


Рис. 1. (Цветной онлайн) Нормированные двухмерные угловые распределения терагерцового излучения на частоте 1 ТГц для гауссова пучка (а), в случае наличия фазовой маски (b) и решетки Дамманна (с) при фокусировке зеркалом с фокусным расстоянием 1 м

фокусировка не оказывает значительного действия на распространение пучка после решетки Дамманна, что выливается в значительное сокращение длины плазменных каналов и, как следствие, увеличение углов распространения генерируемого терагерцового излучения [4, 7, 12]. Следует отметить, что с фазовыми элементами амплитуда терагерцового сигнала была несколько выше, что может объясняться четы-

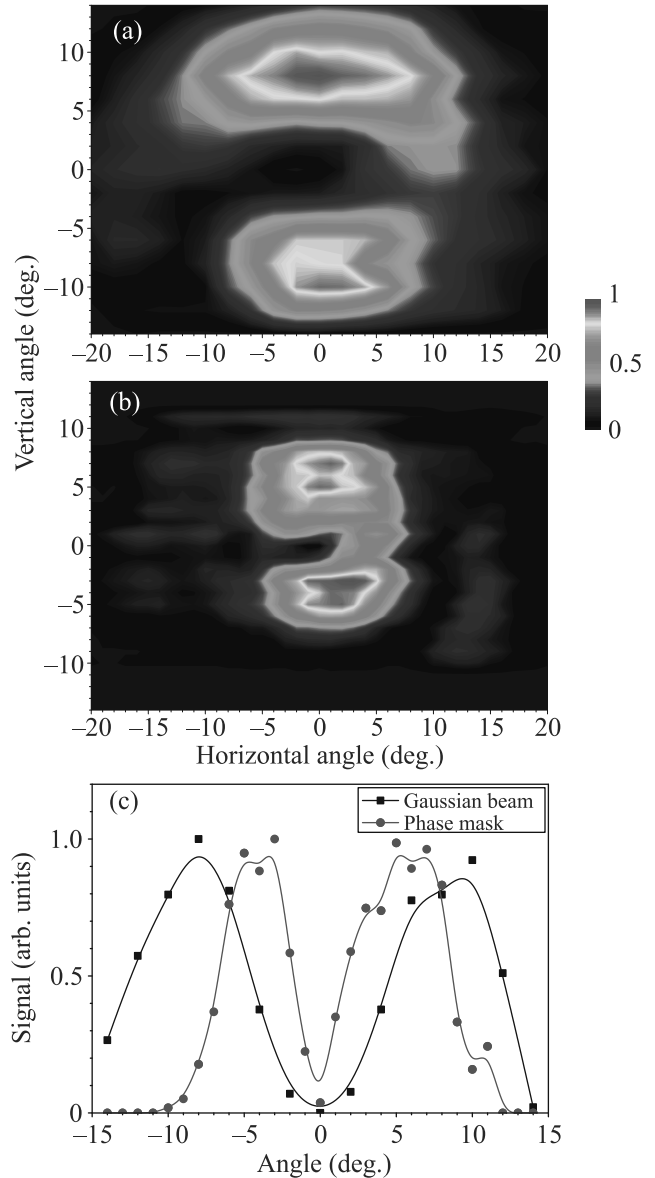


Рис. 2. (Цветной онлайн) Нормированные двухмерные угловые распределения терагерцового излучения на частоте 1 ТГц для гауссова пучка (а), в случае наличия фазовой маски (b) и вертикальные сечения приведенных распределений (с) при фокусировке зеркалом с фокусным расстоянием 0.5 м

рехкратным увеличением энергии исходного лазерного импульса.

Эксперименты, проведенные со сферическим зеркалом с меньшим фокусным расстоянием (0.5 м) показали схожие результаты (рис. 2) – применение фазовой маски за счет создания четырех источников и их интерференции позволило существенно уменьшить углы распространения терагерцового излучения (рис. 2b) по сравнению с одиночным филаментом (рис. 2a). Кроме того, на рис. 2b видны слабые

(не намного выше шумов) дополнительные локальные максимумы, предсказанные в [14]. На рисунке 2с показаны вертикальные сечения изображенных выше терагерцовых пучков. Применение фазовой маски позволило уменьшить углы распространения терагерцового пучка почти в полтора раза.

4. Заключение. Экспериментально были получены двумерные распределения терагерцового излучения на частоте 1 ТГц, генерируемого одним и четырьмя филаментами. Терагерцовый пучок имеет вид двух максимумов, расположенных на оси, перпендикулярной поляризации лазерного пучка. Четыре филамента создавались с помощью фазовой маски и решетки Дамманна. При генерации терагерцового излучения четырьмя плазменными каналами, созданными фазовой маской, за счет интерференции терагерцового излучения от нескольких источников углы распространения терагерцового пучка уменьшаются примерно в полтора раза. Применение решетки Дамманна эти углы наоборот несколько увеличивает, что, по-видимому, связано с значительным уменьшением длины филаментов в этом режиме по сравнению с режимом с использованием фазовой маски и гауссовым пучком без дополнительной фазовой модификации.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (21-49-00023), и грантом National Natural Science Foundation of China (12061131010).

Авторы выражают признательность А.Б. Савельеву (МГУ) за предоставленные фазовые оптические элементы.

1. X.-C. Zhang and J. Xu, *Introduction to THz wave photonics*, Springer, N.Y. (2010), v. 29.
2. X.C. Zhang, A. Shkurinov, and Y. Zhang, *Nat. Photonics* **11**(1), 16 (2017).
3. J. A. Fülöp, S. Tzortzakis, and T. Kampfrath, *Adv. Opt. Mater.* **8**(3), 1900681 (2020).
4. C. D'Amico, A. Houard, M. Franco, B. Prade, A. Mysyrowicz, A. Couairon, and V.T. Tikhonchuk, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 235002 (2007).
5. C. D'Amico, A. Houard, S. Akturk, Y. Liu, J. Le Bloas,

- M. Franco, B. Prade, A. Couairon, V. Tikhonchuk, and A. Mysyrowicz, *New J. Phys.* **10**(1), 013015 (2008).
6. Н. А. Панов, О. Г. Косарева, В. А. Андреева, А. Б. Савельев, Д. С. Урюпина, Р. В. Волков, В. А. Макаров, А. П. Шкуринов, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 715 (2011).
7. G.E. Rizaev, L.V. Seleznev, D.V. Mokrousova, D.V. Pushkarev, and A.A. Ionin, *Opt. Lett.* **47**(22), 5917 (2022).
8. N. A. Zharova, V. A. Mironov, and D. A. Fadeev, *Phys. Rev. E* **82**(5), 056409 (2010).
9. Р. А. Ахмеджанов, И. Е. Иляков, В. А. Миронов, Е. В. Суворов, Д. А. Фадеев, Б. В. Шишкин, *Известия высших учебных заведений. Радиофизика* **52**(7), 536 (2009).
10. E. Suvorov, R. Akhmedzhanov, D. Fadeev, I. Piyakov, V. Mironov, and B. Shishkin, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **32**, 1243 (2011).
11. Г. Э. Ризаев, Д. В. Мокроусова, Д. В. Пушкарев, Д. Е. Шипило, И. А. Николаева, Н. А. Панов, Л. В. Селезнев, О. Г. Косарева, А. А. Ионин, *Письма в ЖЭТФ* **115**(11), 699 (2022).
12. A.P. Shkurinov, A.S. Sinko, P.M. Solyankin, A.V. Borodin, M.N. Esaulkov, V.V. Annenkov, I.A. Kotelnikov, I.V. Timofeev, and X.-C. Zhang, *Phys. Rev. E* **95**, 043209 (2017).
13. S.I. Mitryukovskiy, Y. Liu, B. Prade, A. Houard, and A. Mysyrowicz, *Appl. Phys. Lett.* **102**(22), 221107 (2013).
14. N. Panov, V. Andreeva, O. Kosareva, A. Shkurinov, V. Makarov, L. Berg'e, and S. Chin, *Laser Phys. Lett.* **11**(12), 125401 (2014).
15. А. С. Ларькин, Д. В. Пушкарев, С. А. Дегтярев, С. Н. Хонина, А. Б. Савельев, *Квантовая электроника* **46**(8), 733 (2016).
16. D. Pushkarev, D. Shipilo, A. Lar'kin, E. Mitina, N. Panov, D. Uryupina, A. Ushakov, R. Volkov, S. Karpeev, S. Khonina, O. Kosareva, and A. Savel'ev, *Laser Physics Lett.* **15**(4), 045402 (2018).
17. D. Pushkarev, A. Lar'kin, E. Mitina, N. Zhidovtsev, D. Uryupina, R. Volkov, S. Karpeev, S. Khonina, A. Karabutov, Y.E. Geints, O.G. Kosareva, and A.B. Savelev, *Opt. Express* **29**(21), 34189 (2021).
18. Г. Э. Ризаев, Д. В. Мокроусова, Д. В. Пушкарев, Л. В. Селезнев, А. А. Ионин, *Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук* **49**(7), 3 (2022).

Гигантский планарный эффект Холла в ультрачистом монокристаллическом образце селенида ртути

С. Б. Бобин¹⁾, А. Т. Лончаков

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 7 августа 2023 г.

После переработки 22 августа 2023 г.

Принята к публикации 22 августа 2023 г.

В халькогениде ртути HgSe при использовании в качестве объекта исследования ультрачистого монокристаллического образца с концентрацией электронов $5.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ обнаружен гигантский планарный эффект Холла с амплитудой $\approx 50 \text{ МОм см}$ при $T = 80 \text{ К}$ в магнитном поле 10 Тл . Приводится его осциллирующая зависимость от угла поворота образца в разных магнитных полях. Характерные признаки (период осцилляций, положение экстремумов, корреляция между амплитудой планарного холловского и планарного продольного магнитосопротивления) указывают на то, что в этом немагнитном бесщелевом полуметалле с изотропной поверхностью Ферми планарный эффект Холла индуцируется киральной аномалией. Тем самым получен весомый аргумент в пользу топологической природы электронного спектра HgSe.

DOI: 10.31857/S1234567823190060, EDN: xrawjr

Введение. Планарный эффект Холла (ПЭХ) в качестве нового гальваномагнитного явления был открыт в 1954 г. в кристаллах *n*- и *p*-Ge [1] и объяснен анизотропией магнитосопротивления (МС), отражающей анизотропию поверхности Ферми и времени релаксации. В эксперименте ПЭХ обнаруживается как появление поперечной разности потенциалов в случае, когда магнитное поле и приложенное к образцу электрическое поле, вызывающее протекание тока через образец, находятся строго в одной плоскости. При этом магнитное и электрическое поле должны образовывать угол, отличный от 0 (π) или $\frac{\pi}{2}$ ($\frac{3\pi}{2}$), что достигается вращением образца в магнитном поле. Этим ПЭХ отличается от обычного эффекта Холла, для появления которого необходимо отличие от нуля перпендикулярной к плоскости образца (и электрическому току, соответственно) компоненты магнитного поля. В дальнейшем, помимо немагнитных материалов с анизотропией орбитального МС (более известного в литературе как классическое МС, вызванное действием силы Лоренца), ПЭХ также наблюдался в ферромагнитных системах, таких как Fe_3GeTe_2 [2], $\text{Co}_{60}\text{Fe}_{20}\text{B}_{20}$ [3], $\text{Sr}_4\text{Ru}_3\text{O}_{10}$ [4], $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ [5], эпитаксиальных $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$ структурах [6] и других. Общепринятая трактовка происхождения ПЭХ в подобных системах состоит в изменении вероятности спин-орбитального рассеяния при повороте намагниченности в плоскости образца вместе с маг-

нитным полем относительно электрического тока [7]. Исследования ПЭХ в ферромагнитных материалах выявили возможность практического использования ПЭХ для создания на их базе элементов оперативной магнитной памяти [8]. Кроме того, ПЭХ в ферромагнетиках может быть использован при разработке чувствительных магнитных датчиков с разрешением менее 10 нТл [9].

В последние годы после открытия топологических полуметаллов Дирака [10–12] и Вейля [13–17] интерес к ПЭХ значительно возрос. В 2017 году появились теоретические работы [18, 19], согласно которым в этих материалах появление ПЭХ должно быть следствием присущей им киральной аномалии – не сохранением числа фермионов Вейля с противоположной киральностью в параллельных друг другу электрическом и магнитном поле [20]. Согласно [20], киральная аномалия возникает из-за нарушения фундаментальной симметрии безмассовых фермионов – киральной симметрии. Отметим, что впервые киральная аномалия была обнаружена в эксперименте с Λ -фазой сверхтекучего ^3He , содержащей вейлевские фермионы [21]. Из сказанного выше следует, что ПЭХ может служить своеобразным тестом на наличие в изотропном немагнитном твердом теле киральной аномалии, а значит – и узлов Вейля с противоположной киральностью. Оказалось, что ПЭХ наблюдается в соответствии с предсказаниями теории [18, 19] как в полуметаллах Дирака $\text{ZrTe}_{5-\delta}$ [22], PdTe_2 [23, 24], Cd_3As_2 [25, 26], VAl_3 [27], PtTe_2

¹⁾e-mail: bobin@imp.uran.ru

[28], так и в полуметаллах Вейля Na_3Bi [29], CdPtBi [29, 30], $T_d\text{-MoTe}_2$ [31], WTe_2 [32], TaAs [33]. С другой стороны, в полуметаллах Дирака NiTe_2 [34] и PtSe_2 [35] в качестве основной причины ПЭХ рассматривалась анизотропия орбитального МС.

Кроме ПЭХ, следует также упомянуть другой эффект, проявляющийся в топологических полуметаллах благодаря киральной аномалии, – киральный магнитный эффект (КМЭ) [36–40]. Он состоит в генерации тока, дополнительного к основному, индуцированного киральным дисбалансом, который в свою очередь возникает в магнитном поле, параллельном электрическому. Дополнительный (киральный) ток в КМЭ всегда направлен вдоль основного тока, т.е. КМЭ является продольным эффектом, когда как ПЭХ – поперечным. В эксперименте КМЭ проявляется в виде квадратичной по магнитному полю положительной добавки к проводимости. Считается, что наблюдение КМЭ в топологических полуметаллах является необходимым условием для наблюдения ПЭХ, вызванного киральной аномалией.

Недавно мы обнаружили и исследовали положительную продольную магнитопроводимость, индуцированную КМЭ в образцах селенида ртути с низкой концентрацией электронов n_e в интервале $(5.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3} - 1.7 \times 10^{17} \text{ см}^{-3})$ [41]. Ранее мы также выявили в HgSe особенности поведения продольного и поперечного МС [42], нетривиальную фазу Берри и электронный топологический переход Лифшица при изменении энергии Ферми [43], обнаружили необычный поперечный квантовый эффект в продольном магнитном поле [44]. В совокупности, эти результаты дают веское основание для предположения о наличии в HgSe наряду с тривиальной бесщелевой фазой электронной топологической фазы полуметалла Вейля с отсутствующим центром пространственной инверсии. Поэтому для подтверждения топологической природы HgSe принципиальное значение приобретает фактор ПЭХ. Выявление в немагнитном селениде ртути, обладающим поверхностью Ферми близкой к сферической [45, 46], обусловленного киральной аномалией ПЭХ, являлось главной целью настоящей работы.

Детали эксперимента. В качестве объекта исследования мы выбрали один из образцов HgSe , на котором в [41] нами был изучен КМЭ. Его уникальность заключается в том, что этот образец является ультрачистым. Под этим подразумевается его рекордно низкая для HgSe $n_e = 5.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и рекордно высокая подвижность электронов $3.4 \times 10^5 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$. Образец был изготовлен более 40 лет назад из однородной части слитка, выращенного ме-

тодом Бриджмена, и тогда же был подвергнут отжигу в парах Se . Очевидно, что последовавший затем долговременный пассивный отжиг должен был привести к значительному уменьшению числа междоузельных атомов ртути и вакансий анионной подрешетки (дефектов донорного типа в HgSe [46]), обеспечив тем самым такую низкую концентрацию электронов. Выбор образца с очень низкой энергией Ферми имеет первостепенное значение для обеспечения условия выраженной киральности, способного приблизить HgSe к идеальному полуметаллу Вейля. Основные электронные параметры образца, имевшего форму прямоугольного параллелепипеда, и его геометрические размеры приведены в [41]. Использовалась стандартная для HgSe процедура травления поверхности образца и приготовления омических контактов, описанная в [42]. В работе [43] приведены результаты исследования кристаллической структуры HgSe . Измерения магнитотранспортных свойств были выполнены при $T = 80$ и 150 К стандартным 4-х зондовым методом в магнитном поле до 12 Тл с использованием оборудования ЦКП “Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов” ИФМ УрО РАН. Вращение образца в магнитном поле выполнялось в интервале углов от 0 до π при двух противоположных направлениях магнитного поля $+\mathbf{B}$ и $-\mathbf{B}$, что эквивалентно повороту образца от 0 до 2π . При этом, в зависимости от угла поворота α измерялось как поперечное ρ_{xy} , так и продольное ρ_{xx} МС. Определяющие их поперечное V_{xy} и продольное V_{xx} напряжения регистрировались с двух пар контактов каждое: пары (1-3), (2-4) и пары (1-2), (3-4), соответственно (рис. 1а). В процессе измерений было установлено, что различие между V_{xy} и V_{xx} для разных пар контактов несущественно. Поэтому в дальнейшем под экспериментальными данными ρ_{xy} и ρ_{xx} будут подразумеваться величины, полученные путем усреднения по двум парам контактов. Из-за особенности конструкции ротатора в нашем эксперименте было удобно отсчитывать α от направления, перпендикулярного направлению электрического тока, как показано на рис. 1а.

Для планарного холловского сопротивления ρ_{xy} , вызванного киральной аномалией, и планарного продольного МС ρ_{xx} согласно теории [18] имеют место следующие выражения:

$$\rho_{xy} = \Delta\rho_{\text{chiral}} \sin \alpha \cos \alpha, \quad (1)$$

$$\rho_{xx} = \rho_{\perp} - \Delta\rho_{\text{chiral}} \cos^2 \alpha, \quad (2)$$

где $\Delta\rho_{\text{chiral}} = \rho_{\perp} - \rho_{\parallel}$ – анизотропия МС, вызванная киральной аномалией (амплитуда ПЭХ), $\rho_{\perp}$ и $\rho_{\parallel}$ –

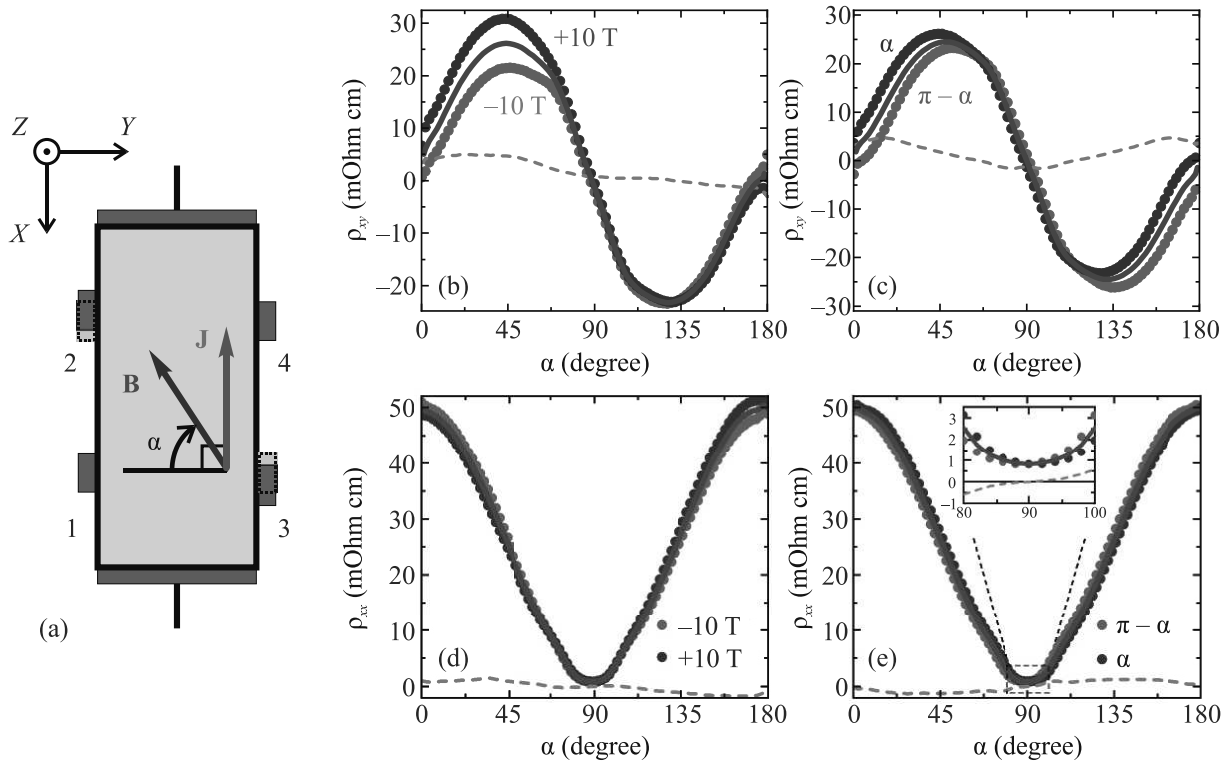


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Геометрия измерения ПЭХ в плоскости XY : $\mathbf{B}$ – приложенное магнитное поле, α – угол поворота магнитного поля, $\mathbf{J}$ – электрический ток. Серым цветом показано реальное расположение холловских контактов на образце, а пунктиром – идеальное, напротив друг друга. (b) – Угловая зависимость необработанного планарного холловского сопротивления ρ_{xy} в поле $+10$ Тл и -10 Тл при $T = 80$ К (символы). Сплошная кривая соответствует усредненному ρ_{xy} по направлению магнитного поля, пунктирная кривая – нечетному вкладу $\delta\rho_{xy}^{\perp}$. (c) – Зависимость усредненного по магнитному полю ρ_{xy} от угла α и $\pi - \alpha$ (символы). Сплошная кривая соответствует усредненному по α ρ_{xy} , пунктирная кривая – четному по углу вкладу $\delta\rho_{xy}^{\parallel}$. (d) – Угловая зависимость необработанного планарного продольного МС ρ_{xx} в поле $+10$ Тл и -10 Тл при $T = 80$ К (символы). Сплошная кривая соответствует усредненному ρ_{xx} по направлению магнитного поля, пунктирная кривая – нечетному вкладу $\delta\rho_{xy}^{\perp}$. (e) – Зависимость усредненного по магнитному полю ρ_{xx} от угла α и $\pi - \alpha$ (символы). Сплошная кривая соответствует усредненному по α МС ρ_{xx} , пунктирная кривая – нечетному по углу вкладу $\delta\rho_{xy}^{\parallel}$.

МС в случае, когда магнитное поле $\mathbf{B}$ перпендикулярно и параллельно электрическому току $\mathbf{J}$ соответственно, находясь при этом в плоскости образца (рис. 1а). Выражение $\Delta\rho_{\text{chiral}}$ через параметры теории, связанные с киральностью, мы обсудим ниже.

Результаты эксперимента и обсуждение.

Прежде чем представить главные экспериментальные результаты, укажем на два основных фактора, искажающих зависимости $\rho_{xy}(\alpha)$ и $\rho_{xx}(\alpha)$. Первый источник погрешности – вклад в ρ_{xy} от обычного эффекта Холла $\delta\rho_{xy}^{\perp}$, обусловленный присутствием перпендикулярной к плоскости образца компоненты магнитного поля $\delta\mathbf{B}_{\perp}$ из-за неидеальной ориентации образца. Поскольку обычный эффект Холла является нечетным по магнитному полю, а ПЭХ согласно (1) – четным, для исключения $\delta\rho_{xy}^{\perp}$ достаточно при-

бегнуть к стандартной процедуре усреднения по магнитному полю:

$$\langle\rho_{xy}(\mathbf{B}, \alpha)\rangle_{\mathbf{B}} = \frac{\rho_{xy}(\mathbf{B}, \alpha) + \rho_{xy}(-\mathbf{B}, \alpha)}{2}. \quad (3)$$

Пример такого усреднения показан на рис. 1b (сплошная кривая) для первоначальных данных $\rho_{xy}(\alpha)$ в поле $+10$ Тл и -10 Тл (символы). Выделенный вклад $\delta\rho_{xy}^{\perp}$ показан пунктирной кривой. Второй тип погрешности связан с неизбежным смещением холловских контактов друг относительно друга, возникающим в процессе изготовления образца, как показано пунктиром на рис. 1а. Неэквивалентность холловских контактов приводит к вкладу $\delta\rho_{xx}^{\parallel}$ в измеряемый поперечный эффект от продольного МС. Согласно (1) и (2), ρ_{xy} является нечетной функцией α , а ρ_{xx} – четной. Поэтому $\delta\rho_{xx}^{\parallel}$ можно

исключить с помощью другого усреднения, только в данном случае по углу:

$$\langle \rho_{xy}(\mathbf{B}, \alpha) \rangle_\alpha = \frac{\langle \rho_{xy}(\mathbf{B}, \alpha) \rangle_{\mathbf{B}} - \langle \rho_{xy}(\mathbf{B}, \pi - \alpha) \rangle_{\mathbf{B}}}{2}, \quad (4)$$

где определенные с помощью (3) $\langle \rho_{xy}(\mathbf{B}, \alpha) \rangle_{\mathbf{B}}$ и $\langle \rho_{xy}(\mathbf{B}, \pi - \alpha) \rangle_{\mathbf{B}}$ представлены символами на рис. 1с. Выделенный четный по углу вклад $\delta \rho_{xx}^\parallel(\alpha)$ показан на рис. 1с пунктирной кривой. Окончательно обработанная зависимость $\rho_{xy}(\alpha)$ в поле 10 Тл показана на рис. 1с сплошной кривой. Процедура обработки данных $\rho_{xx}(\alpha)$ для исключения вклада $\delta' \rho_{xx}^\perp$, возникающего от $\delta \mathbf{B}_\perp$ (рис. 1d), аналогична описанной выше процедуре для $\rho_{xy}(\alpha)$. В окончательном варианте обработки (рис. 1е) исключается нечетный от угла вклад $\delta \rho_{xy}^\parallel$, происходящий от ПЭХ за счет неэквивалентности.

Обработанные таким образом экспериментальные данные $\rho_{xy}(\alpha)$ и $\rho_{xx}(\alpha)$ приведены в виде символов на рис. 2а и б, соответственно. Сплошные кривые – результат подгонки по формулам (1) и (2). Видно, что в соответствии с (1), зависимость $\rho_{xy}(\alpha)$ является осциллирующей с периодом π , демонстрируя экстремумы при $\alpha = \frac{\pi}{4}$ и $\frac{3\pi}{4}$. Зависимость $\rho_{xx}(\alpha)$ имеет такой же период, однако в этом случае максимум имеет место при $\alpha = 0$, а минимум – при $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Таким образом, сдвиг фаз между $\rho_{xy}(\alpha)$ и $\rho_{xx}(\alpha)$ составляет $\frac{\pi}{4}$. Кроме того, правая ось на рис. 2б показывает относительное изменение $\rho_{xx}(\alpha, B)$ при фиксированном B , в соответствии с выражением $\text{MR} = \frac{\rho_{xx}(\alpha, B) - \rho_0}{\rho_0}$, где ρ_0 – удельное сопротивление в нулевом магнитном поле.

В квазиклассической теории [18] при расчете амплитуды ПЭХ, вызванного киральной аномалией, вводятся три характерных длины: 1. $L_a = \frac{D}{\Gamma B}$, где D – коэффициент диффузии кирального заряда, $\Gamma = \frac{e}{2\pi g}$ – транспортный коэффициент, характеризующий киральную аномалию (e – заряд электрона, g – плотность состояний на уровне Ферми); величина L_a^{-1} количественно определяет силу киральной аномалии, вызванной взаимодействием между электрическим и киральным зарядами; 2. $L_c = (D\tau_c)^{\frac{1}{2}}$ – длина диффузии кирального заряда, где τ_c – время релаксации кирального заряда (или время междолинной релаксации [41]); 3. L_x – длина образца в направлении протекания электрического тока. В слабом магнитном поле, определяемом условием $\left(\frac{L_c}{L_a}\right) \ll 1$, в пределе длинного образца $L_x \gg L_c$ согласно [18]

$$\Delta \rho_{\text{chiral}} \sim \left(\frac{L_c}{L_a}\right)^2 \sim B^2, \quad (5)$$

поскольку в этом случае:

$$\frac{L_c}{L_a} = \Gamma B \left(\frac{\tau_c}{D}\right)^{1/2} \approx \frac{\hbar v_F^2}{\varepsilon_F^2} \left(\frac{\tau_c}{\tau}\right)^{\frac{1}{2}} B, \quad (6)$$

где $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, τ – транспортное время релаксации, v_F – скорость Ферми, ε_F – энергия Ферми. В пределе сильного магнитного поля, когда согласно [18] $\frac{L_c}{L_a} \gg 1$, амплитуда ПЭХ должна выйти на насыщение. Подставив в (6) электронные параметры образца HgSe из [41], мы получили $\left(\frac{L_c}{L_a}\right) \approx 0.35B$. Для сравнения результата эксперимента с теорией [18] на рис. 2с приведена зависимость взятых из рис. 2а подгоночных значений $\Delta \rho_{\text{chiral}}$ от магнитного поля (символы). Сплошные кривые – подгонка эксперимента зависимостью $\Delta \rho_{\text{chiral}} \sim B^\gamma$. Видно, что в области $B \lesssim 4$ Тл, где $\frac{L_c}{L_a} \lesssim 1$ экспериментальные данные хорошо подгоняются зависимостью $\Delta \rho_{\text{chiral}} \sim B^{1.8}$, близкой к предсказанной теорией. При $6 \lesssim B \lesssim 12$ Тл ($2 \lesssim \frac{L_c}{L_a} \lesssim 4$) зависимость $\Delta \rho_{\text{chiral}}(B)$ близка к линейной. В соответствии с численным расчетом зависимости $\Delta \rho_{\text{chiral}}$ от $\frac{L_c}{L_a}$ [18], указанная область магнитного поля, по видимому, является переходной от предела слабого к пределу сильного поля, который в настоящем эксперименте оказывается недостижимым. Аналогично, степенную магнитополевою зависимость с $\gamma \simeq (1.8-2.0)$ в низких магнитных полях одновременно с отсутствием насыщения в экспериментально достигаемых полях демонстрирует $\Delta \rho_{\text{chiral}}(B)$ и в ряде топологических полуметаллов, таких как $\text{ZrTe}_{5-\delta}$ [22], Cd_3As_2 [26], PtTe_2 [28], $\text{T}_d\text{-MoTe}_2$ [31] и WTe_2 [32]. Отметим, что во всех этих работах авторы пришли к заключению, что наблюдаемый ПЭХ связан с киральной аномалией. Таким образом, можно отметить, что обнаруженный в ультрачистом HgSe ПЭХ вписывается в концептуальные рамки теории [18]. Независимым аргументом, свидетельствующим в пользу наличия киральной аномалии в HgSe, является одновременное с ПЭХ наблюдение отрицательного продольного МС без тенденции к насыщению (рис. 2d). Обращает на себя внимание тот факт, что наряду с отрицательным продольным МС, наблюдаемым в параллельном электрическому току магнитном поле, наблюдается сильное положительное МС в перпендикулярном электрическому току магнитном поле, возрастающее в ≈ 70 раз в поле 12 Тл, также без тенденции к насыщению (рис. 2е). Заметим, что сосуществование отрицательного МС при $\mathbf{B} \parallel \mathbf{J}$ и сильного положительного МС при $\mathbf{B} \perp \mathbf{J}$ свойственно многим полуметаллам Вейля [47–51], к кандидатам в которые мы относим HgSe.

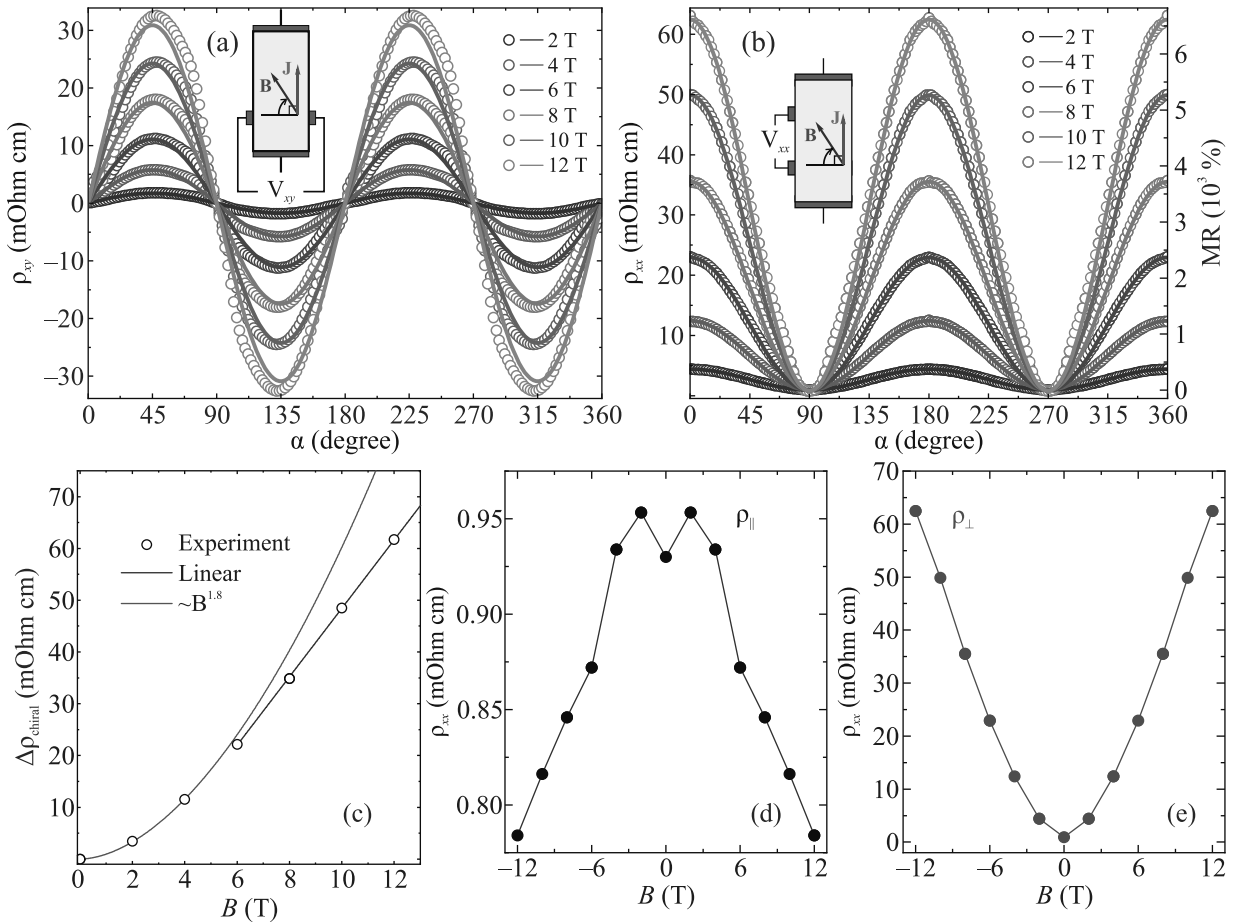


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Угловая зависимость планарного холловского сопротивления $\rho_{xy}(\alpha)$ в разных магнитных полях при $T = 80$ К. Символы – эксперимент, сплошные кривые – подгонка по формуле (1). На вставке – схема измерения поперечного напряжения V_{xy} . (б) – Угловая зависимость планарного продольного МС $\rho_{xx}(\alpha)$ в разных магнитных полях при $T = 80$ К (левая ось); зависимость величины MR от угла вращения (правая ось). Символы – эксперимент, сплошные кривые – подгонка по формуле (2). На вставке – схема измерения продольного напряжения V_{xx} . (с) – Зависимость амплитуды ПЭХ $\Delta\rho_{\text{chiral}}$ от B при $T = 80$ К, построенная с помощью подгоночных данных панели (а) (символы). Сплошные линии – подгонка степенным ($\sim B^{1.8}$) и линейным законом. (д) – Зависимость МС ρ_{xx} от $B \parallel \mathbf{J}$. (е) – Зависимость ρ_{xx} от B при расположенном в плоскости образца поле $\mathbf{B} \perp \mathbf{J}$

Данные на рис. 2а и б можно связать между собой, построив так называемые параметрические кривые – зависимости ρ_{xy} от ρ_{xx} при фиксированном поле B , используя в качестве параметра угол вращения α . Совокупность таких параметрических кривых приведена на рис. 3. Видно, что для HgSe параметрические зависимости при разных B представляют собой вытянутые вправо вдоль оси ρ_{xx} и вложенные друг в друга замкнутые выпуклые кривые. Очевидно, что их вытянутость вдоль оси ρ_{xx} отражает рост величины $\rho_{\perp}$ с ростом B (рис. 2е). Такая картина расположения параметрических кривых свойственна топологическим полуметаллам, причиной ПЭХ в которых является киральная аномалия [29, 33]. В случае, если ПЭХ в твердом теле обусловлен анизотропией

орбитального МС, картина параметрических кривых будет иной: замкнутые выпуклые кривые будут пересекаться друг с другом, при этом заметно смещаясь вправо вдоль оси ρ_{xx} с увеличением B [24, 34, 35, 52], что отражает отсутствие в системе отрицательного МС $\rho_{\parallel}(B)$.

Отдельного внимания заслуживает величина ПЭХ при $T = 80$ К. Амплитуда ПЭХ в ультрачистом HgSe ≈ 50 мОм см в поле 10 Тл (рис. 2а) оказывается экстремально большой, превышая амплитуду ПЭХ в известных топологических полуметаллах [22–35, 52] при близких T и B от 10 до 1000 раз. Это дает основание определить открытый нами ПЭХ в ультрачистом HgSe как “гигантский”. Из рисунка 2б (правая ось) видно, что максимальная величина

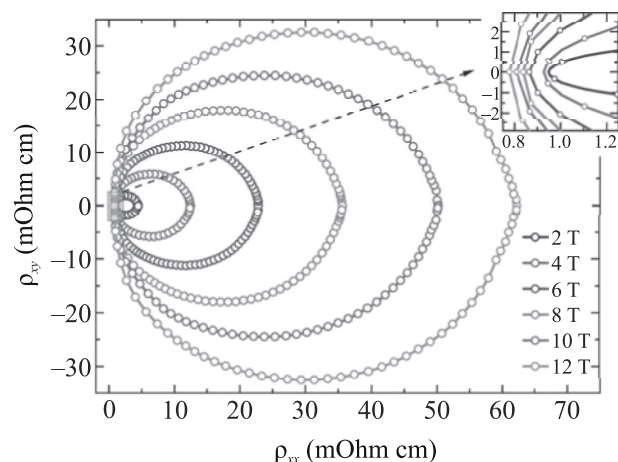


Рис. 3. (Цветной онлайн) Параметрические кривые, демонстрирующие зависимость ρ_{xy} от ρ_{xx} в разных магнитных полях при $T = 80$ К

MR для нашего образца составляет $\approx 7000\%$. Тогда как в других топологических материалах она значительно меньше, находясь в интервале от 25 до 500 % [22, 25, 27, 34, 35]. С увеличением температуры от 80 до 150 К амплитуда ПЭХ уменьшается при $B = 10$ Тл в 5.5 раза до ≈ 9 мОм см (рис. 4). При

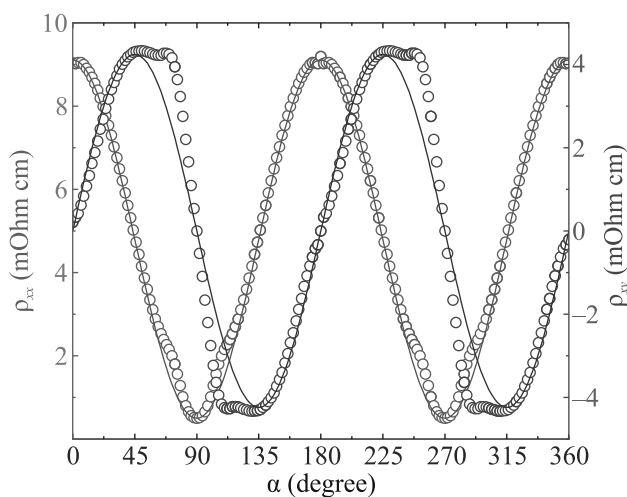


Рис. 4. (Цветной онлайн) Угловая зависимость планарного холловского сопротивления ρ_{xy} (правая ось) и планарного продольного МС ρ_{xx} (левая ось) при $T = 150$ К в магнитном поле 10 Тл. Символы – эксперимент, сплошные линии – подгонка по формулам (1) и (2)

этом максимальная величина MR уменьшается до $\approx 1500\%$. Экстремально большая величина ПЭХ в HgSe может послужить хорошей основой для практического применения чистых монокристаллов селенида ртути в качестве чувствительных датчиков планарной компоненты магнитного поля.

Заключение. В заключение подчеркнем, что открытие в настоящей работе в ультратонком монокристалле HgSe предсказанного теорией ПЭХ вместе с обнаруженным нами ранее в этом же образце КМЭ служит весомым аргументом в пользу существования в этом изотропном и немагнитном материале электронной топологической фазы полуметалла Вейля.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования от 29.09.2020 # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. C. Goldberg and R.E. Davis, Phys. Rev. **94**, 1121 (1954).
2. Y. You, Y. Gong, H. Li, Z. Li, M. Zhu, J. Tang, E. Liu, Y. Yao, G. Xu, F. Xu, and W. Wang, Phys. Rev. B **100**, 134441 (2019).
3. K.M. Seemann, F. Freimuth, H. Zhang, S. Blügel, Y. Mokrousov, D.E. Bürgler, and C.M. Schneider, Phys. Rev. Lett. **107**, 086603 (2011).
4. Y. Liu, J. Yang, W. Wang, H. Du, W. Ning, L. Ling, W. Tong, Z. Qu, G. Cao, Y. Zhang, and M. Tian, Phys. Rev. B **95**, 161103 (2017).
5. J. Li, S.L. Li, Z.W. Wu, S. Li, H.F. Chu, J. Wang, Y. Zhang, H.Y. Tian, and D.N. Zheng, J. Phys. Condens. Matter **22**, 146006 (2010).
6. H.X. Tang, R.K. Kawakami, D.D. Awschalom, and M.L. Roukes, Phys. Rev. Lett. **90**, 107201 (2003).
7. D. Thompson, L. Romankiw, and A. Mayadas, IEEE Trans. Magn. **11**, 1039 (1975).
8. Y. Bason, L. Klein, J.-B. Yau, X. Hong, J. Hoffman, and C.H. Ahn, J. Appl. Phys. **99**, 08R701 (2006).
9. F.N.V. Dau, A. Schuhl, J.R. Childress, and M. Sussiau, Sensors and Actuators A: Physical **53**, 256 (1996).
10. S.M. Young, S. Zaheer, J.C.Y. Teo, C.L. Kane, E.J. Mele, and A.M. Rappe, Phys. Rev. Lett. **108**, 140405 (2012).
11. Z. Wang, Y. Sun, X.-Q. Chen, C. Franchini, G. Xu, H. Weng, X. Dai, and Z. Fang, Phys. Rev. B **85**, 195320 (2012).
12. Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, and Z. Fang, Phys. Rev. B **88**, 125427 (2013).
13. S.-M. Huang, S.-Y. Xu, I. Belopolski, C.-C. Lee, G. Chang, B.K. Wang, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, C. Zhang, S. Jia, A. Bansil, H. Lin, and M.Z. Hasan, Nat. Commun. **6**, 7373 (2015).
14. H. Weng, C. Fang, Z. Fang, B.A. Bernevig, and X. Dai, Phys. Rev. X **5**, 011029 (2015).
15. S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust et al. (Collaboration), Science **349**, 613 (2015).
16. B.Q. Lv, H.M. Weng, B.B. Fu, X.P. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X.C. Huang, L.X. Zhao, G.F. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, and H. Ding, Phys. Rev. X **5**, 031013 (2015).
17. A.A. Burkov, Nature Mater. **15**, 1145 (2016).

18. A. A. Burkov, Phys. Rev. B **96**, 041110 (2017).
19. S. Nandy, G. Sharma, A. Taraphder, and S. Tewari, Phys. Rev. Lett. **119**, 176804 (2017).
20. H. B. Nielsen and M. Ninomiya, Phys. Lett. B **130**, 389 (1983).
21. T. D. C. Bevan, A. J. Manninen, J. B. Cook, J. R. Hook, H. E. Hall, T. Vachaspati, and G. E. Volovik, Nature **386**, 689 (1997).
22. P. Li, C. H. Zhang, J. W. Zhang, Y. Wen, and X. X. Zhang, Phys. Rev. B **98**, 121108 (2018).
23. S. Xu, H. Wang, X.-Y. Wang, Y. Su, P. Cheng, and T.-L. Xia, arXiv (2018), <https://arxiv.org/abs/1811.06767>.
24. Sonika, M. K. Hooda, S. Sharma, and C. S. Yadav, Appl. Phys. Lett. **119**, 261904 (2021).
25. H. Li, H.-W. Wang, H. He, J. Wang, and S.-Q. Shen, Phys. Rev. B **97**, 201110 (2018).
26. M. Wu, G. Zheng, W. Chu, Y. Liu, W. Gao, H. Zhang, J. Lu, Y. Han, J. Zhou, W. Ning, and M. Tian, Phys. Rev. B **98**, 161110 (2018).
27. R. Singha, S. Roy, A. Pariari, B. Satpati, and P. Mandal, Phys. Rev. B **98**, 081103(R) (2018).
28. A. Vashist, R. K. Singh, N. Wadehra, S. Chakraverty, and Y. Singh, arXiv (2018), <https://arxiv.org/abs/1812.06485>.
29. S. Liang, J. Lin, S. Kushwaha, J. Xing, N. Ni, R. J. Cava, and N. P. Ong, Phys. Rev. X **8**, 031002 (2018).
30. N. Kumar, S. N. Guin, C. Felser, and C. Shekhar, Phys. Rev. B **98**, 041103 (2018).
31. F. C. Chen, X. Luo, J. Yan, Y. Sun, H. Y. Lv, W. J. Lu, C. Y. Xi, P. Tong, Z. G. Sheng, X. B. Zhu, W. H. Song, and Y. P. Sun, Phys. Rev. B **98**, 041114 (2018).
32. P. Li, C. Zhang, Y. Wen, L. Cheng, G. Nichols, D. G. Cory, G.-X. Miao, and X.-X. Zhang, Phys. Rev. B **100**, 205128 (2019).
33. Q. R. Zhang, B. Zeng, Y. C. Chiu et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **100**, 115138 (2019).
34. Q. Liu, F. Fei, B. Chen, X. Bo, B. Wei, S. Zhang, M. Zhang, F. Xie, M. Naveed, X. Wan, F. Song, and B. Wang, Phys. Rev. B **99**, 155119 (2019).
35. Z. Li, T. Xiao, R. Zou, J. Li, Y. Zhang, Y. Zeng, M. Zhou, J. Zhang, and W. Wu, J. Appl. Phys. **127**, 054306 (2020).
36. D. E. Kharzeev, Progress in Particle and Nuclear Physics **75**, 133 (2014).
37. B. Z. Spivak and A. V. Andreev, Phys. Rev. B **93**, 085107 (2016).
38. A. A. Burkov, Phys. Rev. B **91**, 245157 (2015).
39. Q. Li, D. E. Kharzeev, C. Zhang, Y. Huang, I. Pletikosi, A. V. Fedorov, R. D. Zhong, J. A. Schneeloch, G. D. Gu, and T. Valla, Nat. Phys. **12**, 550 (2016).
40. A. Sekine, D. Culcer, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **96**, 235134 (2017).
41. A. T. Lonchakov and S. B. Bobin, J. Phys. Condens. Matter **35**, 065501 (2023).
42. A. T. Lonchakov, S. B. Bobin, V. V. Deryushkin, V. I. Okulov, T. E. Govorkova, and V. N. Neverov, Appl. Phys. Lett. **112**, 082101 (2018).
43. S. B. Bobin, A. T. Lonchakov, V. V. Deryushkin, and V. N. Neverov, J. Phys. Condens. Matter **31**, 115701 (2019).
44. A. T. Lonchakov, S. B. Bobin, V. V. Deryushkin, and V. N. Neverov, J. Phys. Condens. Matter **31**, 405706 (2019).
45. C. R. Whittsett, Phys. Rev. **138**, A829 (1965).
46. I. M. Tsidilkovski, *Electron Spectrum of Gapless Semiconductors*, Springer, Berlin, N.Y. (1996).
47. C.-L. Zhang, S.-Y. Xu, I. Belopolski et al. (Collaboration), Nat. Commun. **7**, 10735 (2016).
48. X. Huang, L. Zhao, Y. Long, P. Wang, D. Chen, Z. Yang, H. Liang, M. Xue, H. Weng, Z. Fang, X. Dai, and G. Chen, Phys. Rev. X **5**, 031023 (2015).
49. C. Shekhar, A. K. Nayak, Y. Sun et al. (Collaboration), Nat. Phys. **11**, 645 (2015).
50. Z. Wang, Y. Zheng, Z. Shen, Y. Lu, H. Fang, F. Sheng, Y. Zhou, X. Yang, Y. Li, C. Feng, and Z.-A. Xu, Phys. Rev. B **93**, 121112 (2016).
51. J. Du, H. Wang, Q. Chen, Q. H. Mao, R. Khan, B. J. Xu, Y. X. Zhou, Y. N. Zhang, J. H. Yang, B. Chen, C. M. Feng, and M. H. Fang, Science China Physics, Mechanics & Astronomy **59**, 657406 (2016).
52. W. Gao, M. Han, Z. Chen, A. Zhu, Y. Han, M. Zhu, X. Zhu, and M. Tian, Appl. Phys. Lett. **122**, 173102 (2023).

Сверточные нейронные сети для предсказания морфологических и нелинейно-оптических свойств тонких пленок квазидвумерных материалов

А. А. Попкова¹⁾, А. А. Федянин

Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 августа 2023 г.

После переработки 24 августа 2023 г.

Принята к публикации 26 августа 2023 г.

Двумерные материалы являются перспективными кандидатами для создания планарных фотонных устройств. Основной проблемой использования таких материалов для прикладных применений является сложность создания пленок заданных геометрических параметров. Так, пленки двумерных материалов, изготовленные методами отщепления или химического осаждения, обычно распределяются случайным образом по большой площади и имеют большой разброс толщин. В данной работе мы используем сверточные нейронные сети для предсказания толщины пленки квазидвумерного материала на основе данных оптической микроскопии. В качестве тестового материала был выбран гексагональный нитрид бора, активно использующийся при создании плоских электронных и оптоэлектронных устройств. Благодаря высокому пространственному разрешению микроскопии удастся добиться большой точности в предсказании толщин ровных областей образца, что позволяет проводить быструю характеристику структур. Кроме того, на примере сигнала третьей оптической гармоники, мы показываем возможность предсказания величины нелинейно-оптического отклика пленки, что расширяет область применимости метода.

DOI: 10.31857/S1234567823190072, EDN: xrdazh

1. Введение. Графен, дихалькогениды переходных металлов и гексагональный нитрид бора (ГНБ) – наиболее известные представители семейства двумерных материалов, привлекающие к себе большое внимание благодаря уникальным электронным и оптическим свойствам [1]. Перестраиваемая ширина запрещенной зоны [2], сверхбыстрая динамика носителей [3, 4], яркая фотолюминесценция [5], оптическая анизотропия [6] и насыщаемое поглощение [7], присущие двумерным материалам, являются перспективными свойствами для использования в прикладных устройствах фотоники и оптоэлектроники. На фоне активного развития устройств графеновой электроники [8], все большую популярность приобретает ГНБ. В то время, как большинство двумерных материалов являются металлами или полупроводниками, ГНБ – диэлектрик с шириной запрещенной зоны порядка 6 эВ [9], обладающий гладкой незаряженной поверхностью, что позволяет использовать его в качестве подложек и диэлектрических слоев композитных двумерных устройств [10]. Одной из основных проблем в изготовлении сложных многослойных структур на основе двумерных материалов является создание пленок заданной толщины в диапазоне

от единиц до сотен нанометров. Изготовление двумерных пленок чаще всего производится химическими методами, которые не обеспечивают прецизионного контроля толщины и качества пленки, или механическим отщеплением, в результате которого фрагменты пленок с различным количеством слоев оказываются случайным образом разбросаны по поверхности приемной подложки [11]. В последнем случае, невозможность изготовления пленок заданных параметров частично может быть скомпенсирована точным определением толщин изготовленных образцов. Существующие методы атомно-силовой микроскопии, комбинационного рассеяния света и фотолюминесцентной спектроскопии позволяют точно определить толщины пленок, однако они малоэффективны при работе с большими областями, так как требуют много времени для поиска и идентификации отдельной структуры [12]. Одним из выходов из сложившейся ситуации является совместное применение методов оптической микроскопии и искусственных нейронных сетей (ИНС), которые показали значительные преимущества в задачах компьютерного зрения, таких как сегментация изображений и классификация объектов [13, 14]. В последние годы была показана перспективность использования ИНС для анализа экспериментальных данных и ди-

¹⁾e-mail: popkova@nanolab.phys.msu.ru

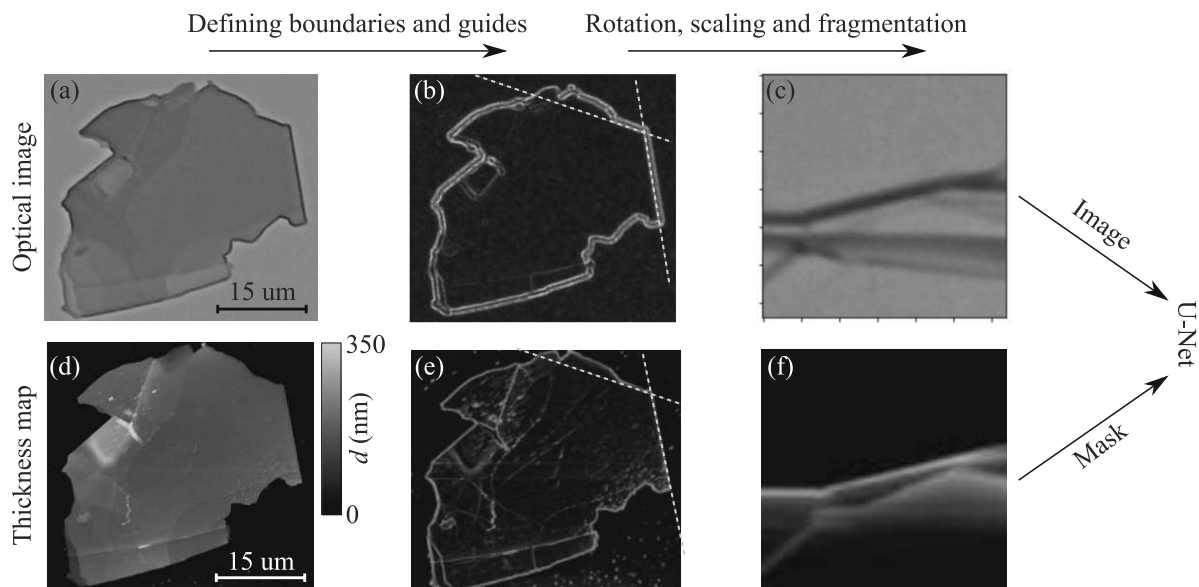


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема сборки датасета для обучения нейронной сети. Верхняя строка – оптические изображения флейков ГНБ: (a) – оригинальное изображение флейка ГНБ; (b) – карта границ флейка (белые кривые) и вычисленных направляющих (пунктирные линии); (c) – полученный после фрагментации элемент датасета. Нижняя строка – карты толщин, полученные методом атомно-силовой микроскопии: (d) – карта АСМ флейка ГНБ; (e) – карта границ флейка (белые кривые) и вычисленных направляющих (пунктирные линии); (f) – полученная после фрагментации маска, соответствующая элементу (c)

зайна структур под требуемые свойства [15–18], а также физическая реализация ИНС на базе оптических структур [19, 20]. В ряде работ была показана возможность определения толщин тонких пленок двумерных материалов по измеренным гиперспектральным изображениям образца с использованием сверхточных нейронных сетей [21, 22]. Однако измерение гиперспектральных изображений требует применения сложного оборудования, которое зачастую не позволяет достичь высокого пространственного разрешения.

В данной работе, при помощи сверхточной нейронной сети архитектуры U-Net [23] показана возможность предсказания толщин пленок гексагонального нитрида бора по данным оптических изображений образца, что не только делает процесс характеристики быстрым и доступным, но и позволяет достичь высокого пространственного разрешения. Дополнительным преимуществом метода является возможность его использования для предсказания не только морфологических, но и оптических свойств образца, в том числе нелинейно-оптических, которые активно применяются для неинвазивной характеристики наноструктур [24]. Данный подход показан на примере сигнала третьей оптической гармоники и демонстрирует высокую точность предсказания.

2. Предсказание толщины пленок нитрида бора. Обучение нейросети производилось на оптических изображениях фрагментов тонких пленок (флейков) гексагонального нитрида бора, изготовленных стандартным методом механического отщепления с последующим переносом при помощи полиметилметакрилата (ПММА) на приемную подложку из плавленого кварца. В результате такого метода по поверхности подложки оказываются хаотически расположены флейки ГНБ различных толщин, латеральные размеры которых составляют десятки микронетров. Изображения образцов были получены при помощи оптического микроскопа Olympus BX53 в схеме освещения на просвет и на отражение. В качестве детектора использовалась цветная КМОП-камера, позволяющая получать RGB-изображения высокого разрешения разрядностью 8 бит. Пример изображения флейка с областями разных толщин показан на рис. 1а. Видно, что при освещении флейка белым светом части образца, имеющие различные толщины, оказываются окрашены в разные цвета, что обусловлено эффектом интерференции света в тонких пленках. Толщины флейков определялись при помощи атомно-силового микроскопа NT-MDT NTEGRA, работающего в полуконтактном режиме. Характерная толщина кантилевера, определяющая

точность сканирования, составляла примерно 10 нм. Карта толщин образца, соответствующая оптическому изображению флейка, показана на рис. 1d. Толщины всех исследованных образцов оказались лежащими в пределах от 2 до 180 нм, за исключением небольшой высокой области флейка, представленного на рис. 1, толщина которой составляет порядка 350 нм. Данная область была исключена из дальнейшей работы, так как выборка не имеет других элементов сходной толщины, в связи с чем искомое значение следует считать выбросом. Гистограмма распределения толщин пленок по структурам представлена на рис. 2. Наблюдаемое распределение не соответствует нормальному, однако достаточно полно охватывает исследуемый диапазон.

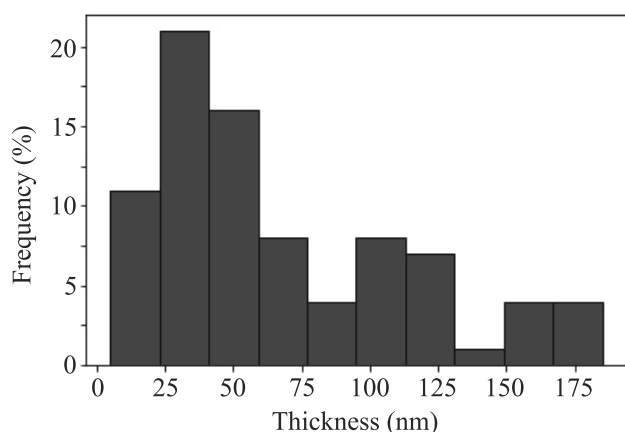


Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения толщин образцов ГНБ по датасету

В качестве датасета для обучения нейронной сети был выбран вариант, состоящий из пары картинок типа изображение-маска. В качестве масок для обучения ИНС использовались карты толщин. Для сопоставления пар изображений между собой границы флейков находились при помощи градиентного метода, после чего определялись положения и углы поворота направляющих осей, относительно которых выполнялось масштабирование и поворот изображений (рис. 1b). Изображения масок подвергались дополнительному сглаживанию и выравниванию для компенсации дефектов, обусловленных методом измерения толщинных карт. Так как набор экспериментальных образцов ограничен и составляет около 80 штук, то для обучения ИНС требуется расширение датасета. Для этого был выбран метод фрагментирования при помощи квадратной сетки, в котором количество элементов датасета увеличивается при помощи разбиения имеющихся изображений

на более мелкие части с возможностью применения к ним дополнительной аугментации (случайного поворота или случайного вращения) (рис. 1с). Для выделения только целевых изображений был использован бинарный классификатор для масок, который на основании среднего значения пикселя на маске определял присутствие на нем флейка. Изображения со средним значением менее 1 нм, т.е. содержащие только подложку, отбрасывались. Размер элемента датасета подбирался для оптимальной скорости работы сети и составил 128 пикселей для предсказания толщины образца и 32 пикселя для предсказания нелинейно-оптического отклика. Итоговый размер датасета для предсказания толщины образца составил порядка 10^4 элементов. Так как интенсивность 8-битного RGB-изображения лежит в диапазоне от 0 до 255, то для удобства обучения изображения были масштабированы с использованием min-max нормализации так, чтобы целевой диапазон сигнала лежал в пределах от 0 до 1. Итоговый датасет был разделен на три части: тренировочную (train), тестовую (test) и валидационную (validate) – в отношении 70:20:10.

Для предсказания толщин пленок была построена, обучена и протестирована сверточная ИНС типа U-Net [22], решающая задачу попиксельного предсказания маски образца. Варьируемыми параметрами сети служили количество слоев сети, размер используемого ядра свертки и количество данных, подаваемое на вход (размер батча). ИНС моделировалась в программной среде Python с использованием пакетов PyTorch, Numpy и Matplotlib. В качестве функции потерь использовалось попиксельное среднеквадратичное отклонение (MSE) значений толщин предсказанной карты от маски. Для оценки точности предсказания использовалась средняя по изображениям батча доля пикселей, для которой отклонение толщины между предсказанной и заданной составляла не более 2 нм:

$$Q = \frac{1}{N} \sum_i i \Big|_{|d_i - d_{pr}| < 2}, \quad (1)$$

где N – общее количество пикселей изображения, d_i и d_{pr} – заданное и предсказанное значение толщины пикселя соответственно. Значение отклонения в 2 нм было взято как максимальное значение флуктуаций толщины, получаемое при определении толщины маски методом атомно-силовой микроскопии. Для оценки способности сети обобщать независимый набор данных использовался подход кросс-валидации, поочередной исключаящий одну из подвыборок. Типичный вид кривой обучения сети, а также зависи-

мость точности предсказания от номера эпохи (итерации обучения на полном датасете) для ИНС с 10 слоями, использующей ядра свертки размером 3×3 , показаны на рис. 3а. Монотонная спадающая кри-

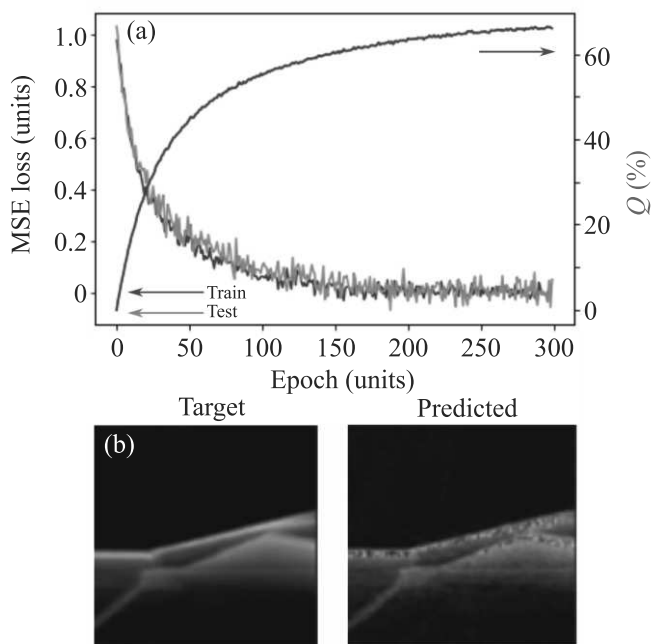


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость функции потерь для обучающего (синяя кривая) и тестового (оранжевая кривая) наборов и качества предсказания (зеленая кривая) от номера эпохи. (б) – Изображение заданной маски для элемента датасета (слева) и результат соответствующего предсказания ИНС (справа)

вая функции потерь, постепенно выходящая в насыщение, и соответствующая ей кривая увеличения точности предсказания толщины по мере обучения сети свидетельствует о хорошей способности к обучению модели. Максимально достигнутые значения точности предсказания сетей различных конфигураций приведены в табл. 1. Наибольшей точности предсказания в 88 % удалось достичь для ИНС, состоящей из 16 слоев и использующей ядра свертки размером 5×5 . Типичный вид заданной и предсказанной карты толщин для данного случая показан на рис. 3б. Анализ вида толщинных карт позволяет сделать вывод, что наибольший вклад в функцию ошибок вносят элементы датасета, обладающие существенными перегибами. Исключение из датасета элементов, содержащих перепады высот более чем на 15 нм, позволило повысить точность предсказаний ИНС до 95 %. Сравнение полученной точности на всем датасете и датасете, не содержащем перегибов, демонстрирует повышение точности предска-

ний для всех конфигураций ИНС, что подтверждает влияние качества изображений датасета. Отдельное внимание заслуживает тот факт, что для оптимального датасета оказывается достаточно эффективными конфигурации сети, состоящие из слоев с ядрами свертки размерами 1×1 , что демонстрирует возможность упрощения применяемой архитектуры.

Таблица 1. Сводная таблица качества предсказаний Q (в процентах) толщин образца ИНС для различных ее конфигураций на всем датасете и датасете, не содержащем элементов с существенными перегибами

Количество слоев/ размер ядра свертки	Весь датасет	Датасет без перегибов
10 / (1×1)	65	91
10 / (3×3)	68	92
16 / (1×1)	85	94
16 / (3×3)	83	95
16 / (5×5)	88	95

3. Предсказание нелинейно-оптического сигнала от пленок нитрида бора. Второй частью работы являлось предсказание нелинейно-оптического отклика (НЛО) пленок ГНБ по оптическим изображениям. В качестве нелинейно-оптического отклика был выбран сигнал третьей оптической гармоники, генерируемый образцом. В качестве масок в данном случае использовались карты распределения мощности третьей оптической гармоники по поверхности образца, полученные при помощи сканирования флейков сфокусированным пучком фемтосекундного титан-сапфирового лазера [25]. Величина фокусной перетяжки составляла 2 мкм, шаг смещения образца, определяющий разрешение итогового изображения, – 0.3 мкм. Для сборки датасета разрешение карт повышалось при помощи взятия взвешенного среднего от имеющихся элементов, а разрешение оптических изображений понижалось при помощи взятия среднего от соседних пикселей (AveragePool). В итоге был собран датасет, состоящий из пар “изображение-маска” с пространственным размером элемента 32 пикселя. Пример маски датасета показан на рис. 4а. Видно, что на элементе присутствуют перегибы, нелинейный отклик от которых существенно превышает среднее значение по образцу. Данный эффект обусловлен возникновением стрессовых напряжений, приводящих к деформации кристаллической решетки материала и локальному усилению эффективности нелинейно-оптических эффектов [26].

На данном датасете было проведено обучение ИНС, аналогичных тем, что использовались для

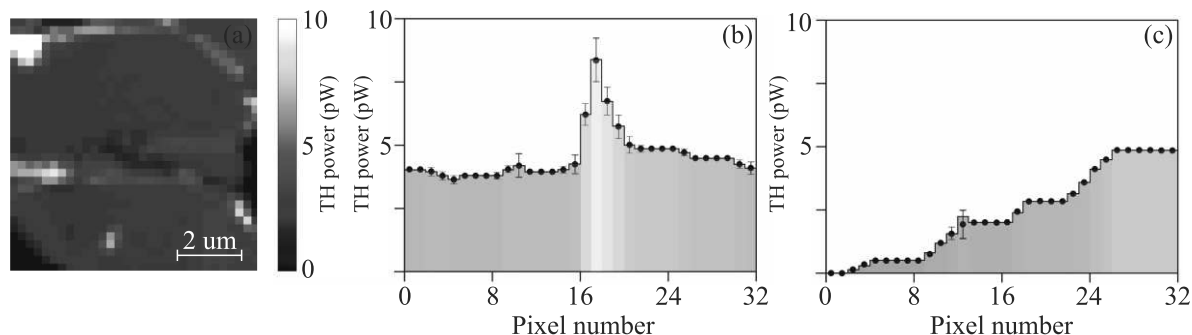


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Элемент датасета для предсказания величины сигнала ТГ (ненормированный). (b) и (с) – Зависимость мощности ТГ от номера пикселя для среза двух элементов датасета, содержащих (b) и не содержащих (с) существенных перегибов. Линиями показаны экспериментальные данные, точками – результаты предсказания сети, усредненные по 10 попыткам

предсказания толщин образцов. В качестве меры точности предсказания использовалась доля пикселей, для которых заданная и предсказанная мощности отличаются не более чем на 0.5 пВт. Полученные точности предсказания приведены в табл. 2 (колонка “НЛО”) и оказываются ниже, чем аналогичные значения для задачи предсказания толщин. Чтобы проанализировать полученные результаты, были построены зависимости распределения мощности ТГ от номера пикселя в срезе элемента датасета. Для элемента датасета, имеющего перепад толщины в 25 нм (рис. 4b) основная погрешность в предсказании нелинейного отклика наблюдается в области перепада высот. Погрешность в предсказании сигнала с ровного участка образца при этом пренебрежима мала. Для элемента, имеющего ступенчатую структуру с монотонным изменением толщины (рис. 4с) точность предсказания отклика оказывается существенно выше, что обусловлено отсутствием в датасете элементов, вносящих значительную погрешность.

Таблица 2. Сводная таблица качества предсказаний Q (в процентах) ИНС для задачи определения толщины (столбец “толщина”) и нелинейного отклика (столбец “НЛО”) образца

Количество слоев/ размер ядра свертки	Толщина	НЛО
10 / (1×1)	65	56
10 / (3×3)	68	64
16 / (1×1)	85	72
16 / (3×3)	83	75
16 / (5×5)	88	78

Стоит отметить, что полученные точности, вероятно, могут быть увеличены дальнейшей оптимизацией параметров используемой ИНС, однако даже имеющиеся на данный момент значения обладают достаточной точностью для практических применений.

4. Заключение. Таким образом, показана возможность предсказания морфологических и нелинейно-оптических характеристик тонких пленок гексагонального нитрида бора при помощи сверточных нейронных сетей архитектуры U-Net. Максимальная достигнутая точность предсказания толщины образца для экспериментального датасета составила 88 %. Показано, что полученное значение может быть улучшено до 95 % при помощи очистки датасета от элементов, содержащих значительный перепад толщины, которые являются также неактуальными для практических применений. Кроме того, продемонстрирована возможность предсказания нелинейно-оптического отклика образца, в частности интенсивности сигнала третьей оптической гармоники, с точностью до 78 %. Более низкая точность предсказания интенсивности третьей оптической гармоники по сравнению с толщиной обусловлена меньшим размером датасета, а также имеющейся неоднозначностью в зависимости сигнала нелинейного отклика от толщины образца [25].

Полученные результаты показывают перспективность использования сверточных нейронных сетей для быстрой оптической и нелинейно-оптической характеристики образцов квазидвумерных материалов, что необходимо как для фундаментальных научных задач, так и для практического использования таких структур при создании более сложных электронных и оптоэлектронных приборов.

Авторы выражают благодарность И. М. Антропову и В. О. Бессонову за помощь в проведении измерений и полезные дискуссии.

Работа выполнена при поддержке некоммерческого Фонда развития науки и образования “Интеллект” и Фонда развития теоретической физики и математики “Базис” (грант # 19-2-6-28-1).

Код работы и примеры использования датасета доступны по ссылке https://github.com/AnyaPopkova/JETP_2D.git.

1. F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, and A. Ramasubramaniam, *Nat. Photonics* **8**(12), 899 (2014).
2. S. Susarla, A. Kutana, J.A. Hachtel, V. Kochat, A. Apte, R. Vajtai, J.C. Idrobo, B.I. Yakobson, C.S. Tiwary, and P.M. Ajayan, *Adv. Mater.* **29**, 1702457 (2017).
3. J.M. Dawlaty, S. Shivaraman, M. Chandrashekhar, F. Rana, M.G. Spencer, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 042116 (2008).
4. A.A. Popkova, A.A. Chezhegov, M.G. Rybin, I.V. Soboleva, E.D. Obraztsova, V.O. Bessonov, and A.A. Fedyanin, *Adv. Opt. Mater.* **10**(4), 2101937 (2022).
5. Y. Chen, J. Xi, D.O. Dumcenco, Z. Liu, K. Suenaga, D. Wang, Z. Shuai, Y.-S. Huang, and L. Xie, *ACS Nano* **7**, 4610 (2013).
6. Л.В. Котова, Л.А. Алтынбаев, М.О. Жукова, Б.Т. Хоган, А. Балдычева, М.А. Калитеевский, В.П. Кочерешко, *Известия РАН. Серия физическая* **86**(7), 976 (2022).
7. C. Ma, C. Wang, B. Gao, J. Adams, G. Wu, and H. Zhang, *Appl. Phys. Rev.* **6**, 041304 (2019).
8. Y. Wu, D.B. Farmer, F. Xia, and P. Avouris, *Proc. IEEE* **101**(7), 1620 (2013).
9. G. Cassaboies, P. Valvin, and B. Gil, *Nat. Photonics* **10**, 262 (2016).
10. Е.Н. Опарин, М.О. Жукова, В.Г. Булгакова, С.А. Позднякова, А.Н. Цыпкин, *Фотоника* **14**(3), 264 (2020).
11. R. Frisenda, E. Navarro-Moratalla, P. Gant, D.P. De Lara, P. Jarillo-Herrero, R.V. Gorbachev, and A. Castellanos-Gomez, *Chem. Soc. Rev.* **47**, 53 (2018).
12. A. Crovetto, P.R. Whelan, R. Wang, M. Galbiati, S. Hofmann, and L. Camilli, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10**, 25804 (2018).
13. E. Moen, D. Bannon, T. Kudo, W. Graf, M. Covert, and D. van Valen, *Nat. Methods* **16**, 1233 (2019).
14. A. Garcia-Garcia, S. Orts-Escolano, S. Oprea, V. Villena-Martinez, P. Martinez-Gonzalez, and J.A. Garcia-Rodriguez, *Appl. Soft Comput.* **70**, 41 (2018).
15. К.Р. Сафронов, В.О. Бессонов, А.А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **114**(6), 360 (2021).
16. X. Han, Z. Fan, Z. Liu, C. Li, and L.J. Guo, *InfoMat* **3**(4), 432 (2021).
17. S. An, C. Fowler, B. Zheng, M.Y. Shalaginov, H. Tang, H. Li, L. Zhou, J. Ding, A.M. Agarwal, C. Rivero-Baleine, K.A. Richardson, T. Gu, J. Hu, and H. Zhang, *ACS Photonics* **6**(12), 3196 (2019).
18. Р.Ш. Минязев, А.А. Румянцев, С.А. Дыганов, А.А. Баев, *Известия РАН. Серия физическая* **82**(12), 1685 (2018).
19. А.И. Мусорин, А.С. Шорохов, А.А. Чежегов, Т.Г. Балуюн, К.Р. Сафронов, А.В. Четвертухин, А.А. Грунин, А.А. Федянин, *УФН* **66** (2023); <https://doi.org/10.3367/UFNr.2023.07.039505>.
20. T. Yan, J. Wu, T. Zhou, H. Xie, F. Xu, J. Fan, L. Fang, X. Lin, and Q. Dai, *Phys. Rev. Lett.* **123**(2), 023901 (2019).
21. Y. Saito, K. Shin, K. Terayama, S. Desai, and M. Onga, Y. Nakagawa, Y. M. Itahashi, Y. Iwasa, M. Yamada, and K. Tsuda, *npj Comput. Mater.* **5**, 1 (2019).
22. X. Dong, H. Li, Z. Jiang, T. Grünleitner, I. Güler, J. Dong, and A.W. Koch, *ACS Nano* **15**(2), 3139 (2021).
23. O. Ronneberger, P. Fischer, and T. Brox, *U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation*, in *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention—MICCAI 2015: 18th International Conference*, Munich, Germany, Proceedings, Springer International Publishing (2015), part III 18, p. 234.
24. М.Ю. Еремчев, *Письма в ЖЭТФ* **118**(4), 282 (2023).
25. A.A. Popkova, I.M. Antropov, J.E. Froch, S. Kim, I. Aharonovich, V.O. Bessonov, A.S. Solntsev, AND A.A. Fedyanin, *ACS Photonics* **8**(3), 824 (2021).
26. X.S. Kong, X.Y. Wu, L. Geng, and W.D. Yu, *Front. Phys.* **10**, 1032671 (2022).

Особенности скейлинга аномального эффекта Холла в нанокompозитных пленках $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ ниже порога перколяции: Проявление со-туннельной холловской проводимости?

С. Н. Николаев⁺¹⁾, К. Ю. Черноглазов⁺, А. С. Бугаев^{*×}, А. Б. Грановский^{°▽}, В. В. Рыльков^{+×▽1)}

⁺Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^{*}Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

[×]Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 141190 Фрязино, Россия

[°]Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

[▽]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 июля 2023 г.

После переработки 31 августа 2023 г.

Принята к публикации 1 сентября 2023 г.

Изучен скейлинг в поведении сопротивления аномального эффекта Холла $\rho_{\text{АНЕ}}$ от продольного ρ в нанокompозитах $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с низкой концентрацией диспергированных атомов Со и Fe ($N_d \sim 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) в аморфной матрице LiNbO_3 . Исследования выполнены ниже порога перколяции ($x_p \approx 49 \text{ ат. \%}$) в диапазоне $x \approx 40\text{--}48 \text{ ат. \%}$, в котором наблюдается логарифмический закон в температурной зависимости проводимости $\sigma \propto \ln T$ ($x \approx 44\text{--}48 \text{ ат. \%}$), переходящий в закон “1/2” $\ln \sigma \propto -(T_0/T)^{1/2}$ при $x \approx 40\text{--}42 \text{ ат. \%}$, характерный для со-туннельных процессов переноса в нанокompозитах. Обнаружено, что в скейлинговой зависимости $\rho_{\text{АНЕ}}/x \propto [\rho(x)]^n$ степень $n \approx 0.24$ с точностью 5 % совпадает с n в аналогичной зависимости для НК на базе иной матрицы $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ с высоким содержанием $N_d \sim 10^{21}\text{--}10^{22} \text{ см}^{-3}$, а также с n в параметрической зависимости $\rho_{\text{АНЕ}} \propto [\rho(T)]^n$ для образцов с наименьшими $x \approx 40 \text{ ат. \%}$. Обнаруженные особенности связываются с коррелированным изменением вероятности со-туннельных переходов в совокупности из более 3-х центров под действием спин-орбитального взаимодействия. Не исключается также возможность проявления туннельного аномального эффекта Холла барьерного типа на интерфейсах гранул.

DOI: 10.31857/S1234567823190084, EDN: xrelej

1. Введение. Аномальный эффект Холла (АЭХ) является центральным в группе нечетных по намагниченности явлений переноса и одним из первых обнаруженных эффектов, обусловленных влиянием спин-орбитального взаимодействия (СОВ) на транспорт спин-поляризованных электронов в системах с металлической проводимостью. Несмотря на почти 150-летнюю историю изучения АЭХ многие вопросы относительно природы АЭХ и его аналога – спинового эффекта Холла, одного из ключевых эффектов спинтроники, не решены [1, 2]. Обнаружение топологического и антиферромагнитного АЭХ [3, 4] (не пропорционального намагниченности), а также АЭХ в новом классе магнитных материалов, так называемых альтермагнетиках (altermagnets) [5], свидетельствует о дополнительных возможных механиз-

мах АЭХ и сопутствующих магнитотранспортных явлений.

Новый толчок в развитии исследования АЭХ в высокорезистивных магнитно-неоднородных структурах вызвали также сравнительно недавние теоретические работы, в которых предсказывался АЭХ в режиме туннельного (ТАЭХ) переноса спин-поляризованных электронов в магнитных туннельных переходах (МТП). В этом случае ТАЭХ определяется СОВ при туннелировании, который может быть связан с эффектами Рашбы и Дрессельхауза за счет нецентросимметричности кристаллической структуры материала туннельной прослойки [6], с рассеянием электронов внутри барьерной прослойки на примесях с большой константой СОВ [7]; эффектом Рашбы, индуцированным внешним напряжением смещения МТП [8], или внутренним эффектом Рашбы, обусловленным интерфейсным барьером на границе металлического

¹⁾e-mail: niklser@list.ru; vvrylkov@mail.ru

электрода и туннельной прослойки [9]. Недавно также был рассмотрен комбинированный вариант СОВ, вызванного внешним напряжением смещения МТП и интерфейсным барьером [10].

Однако экспериментальные исследования ТАЭХ весьма затруднительны из-за шунтирования холловской э.д.с. металлическими электродами МТП, размеры которых существенно превосходят толщину туннельной прослойки [11]. Поэтому не случайно, что первые проявления ТАЭХ были зафиксированы нами на примере нанокмпозитов (НК) $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ (для краткости сплав $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ будем обозначать как CoFeB) [11] с округлыми гранулами, в которых их размер ($\sim 2-4$ нм) не намного больше туннельных зазоров между ними (~ 1 нм), в отличие от МТП. Обнаруженный ТАЭХ в [11] был объяснен с привлечением механизма [7], т.е. рассеянием электронов при туннелировании за счет СОВ на диспергированных атомах Fe и Co, содержащихся в изолирующей матрице в больших концентрациях ($N_d \sim 10^{21}-10^{22} \text{ см}^{-3}$). Однако, в аналогичных пленках $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с большим содержанием диспергированных атомов Fe и Co, но сильно вытянутыми гранулами (отношение поперечного размера $d_\perp$ вдоль роста НК к латеральному $d_\parallel$ достигало 5), обнаружить вклад ТАЭХ уже не удалось [12].

Заметим, что токи шунтирования могут быть настолько велики, что фиксация падения напряжения, обусловленного их протеканием через электроды МТП, может быть использовано для анализа механизма формирования ТАЭХ [10]. (В [10] при пропускании тока через вертикальную структуру Pt/MgO/CoFeB регистрировалось падение напряжения в плоскости Pt электрода. Таким образом, использовался метод изучения эффекта Холла, подобный методу холловского тока, развитому для вертикальных структур с расщепленным электродом [13]).

Недавно нами были синтезированы тонкие пленки НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ на Si подложках, магнетосопротивление и проводимость которых демонстрировали эффекты совместного резонансного туннелирования многих электронов через цепочки гранул (или со-туннелирования от англ. co-tunneling; см. [14] и ссылки там). При этом пленки обладали небольшой вытянутостью гранул $d_\perp/d_\parallel \approx 1.5$ и относительно малым содержанием диспергированных атомов Fe и Co ($N_d \sim 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) в аморфной матрице LiNbO₃. В этих условиях должна возрасти роль интерфейсных областей гранул и, следовательно, можно было ожидать иных особенностей проявления ТАЭХ, чем в ранее изученных нами образцах

$(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ [11]. Кроме того, АЭХ в режиме со-туннельного электронного переноса, насколько нам известно, ранее не анализировался, что в итоге и инициировало данную работу.

2. Образцы и методы исследований. Пленки $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ толщиной 150 нм были получены методом ионно-лучевого распыления на Si подложках с использованием составной мишени из пластины $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ с неравномерно расположенными навесками LiNbO₃, что позволяло в едином цикле формировать НК с различным содержанием металла в диапазоне $x = 10-50$ ат. % (см. детали в [14]). Транспортные и магнитные свойства НК изучались на универсальных образцах, выполненных с использованием взрывной (lift-off) фотолитографии в форме двойного холловского креста. Эксперименты были выполнены с помощью магнитной измерительной системы PPMS Dynacool-14 в слабых электрических полях ≤ 10 В/см, в диапазоне температур $T = 4.2-200$ К, в магнитном поле до 14 Тл.

Структурные исследования, выполненные с помощью просвечивающей растровой электронной микроскопии, показали, что пленки НК представляют собой ансамбль хаотично расположенных гранул CoFeB размером $a_g \approx 2.5-4.0$ нм в матрице LiNbO₃. Гранулы немного вытянуты в направлении роста пленки; отношение размера гранул поперек плоскости пленки к размеру вдоль пленки $d_\perp/d_\parallel \approx 1.5$ [14]. Отметим, что в изученных нами ранее пленках $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, полученных на ситалле [12], металлические гранулы были существенно удлинены вдоль роста пленки. Их размеры составляли 10-15 нм в направлении, перпендикулярном плоскости пленки, и 2-4 нм в плоскости пленки. Такое различие форм гранул могло возникнуть из-за меньшей температуры роста пленки, обусловленной высокой теплопроводностью кремния. Кроме того, подложки Si являются кристаллическими в отличие от аморфного ситалла, что также могло привести к различиям в структуре НК.

3. Результаты и обсуждение. Температурные зависимости проводимости $\sigma(T)$ исследуемых структур представлены на рис. 1а. Для НК с содержанием металла $x \approx 44-48$ ат. % (ниже порога перколяции $x_p \approx 49$ ат. %) проводимость в широком диапазоне температур описывается логарифмическим законом $\sigma \propto \ln T$ (см. вставку к рис. 1а), характерным для сильной туннельной связи между соседними гранулами при величине межгранульного туннельного кондактанса G_t , заметно превышающей квант проводимости: $g = G_t/(2e^2/h) \geq 1$ [15]. При содержании металлических гранул ниже

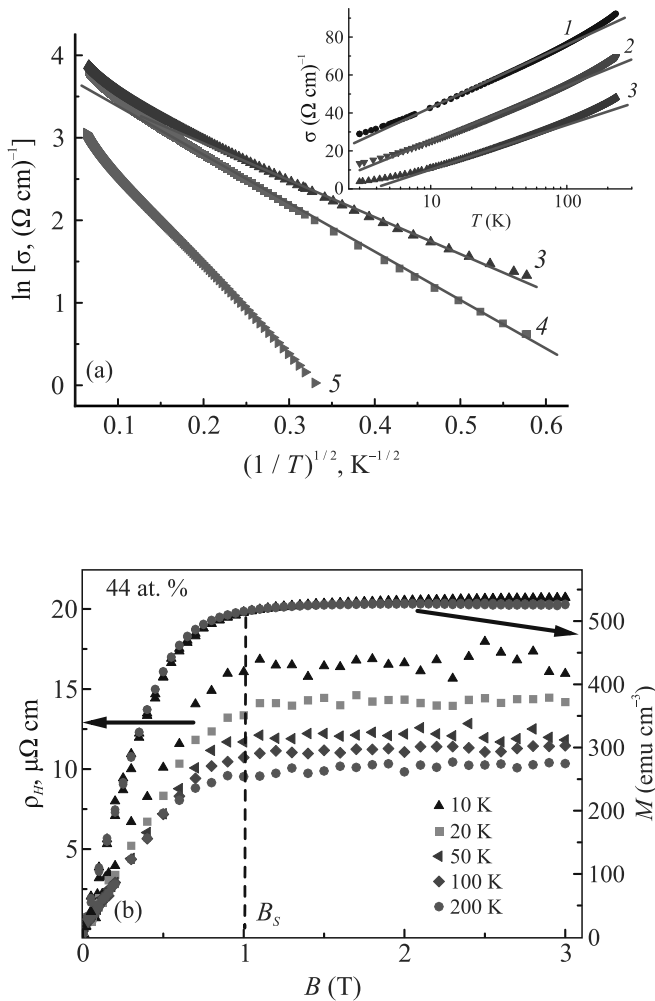


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Температурные зависимости проводимости пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ $\sigma(T)$ в координатах $\ln \sigma - (1/T)^{1/2}$. На вставке – температурные зависимости $\sigma(T)$ в координатах $\sigma - \log T$. Зависимости получены для образцов с различным содержанием ферромагнитного сплава (кривые 1–5): 1 – 48; 2 – 46; 3 – 44; 4 – 42; 5 – 40 ат. %. (b) – Магнитопольные зависимости холловского сопротивления ρ_H и намагниченности для образца $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с содержанием $x = 44$ ат. % при различных температурах

некоторой критической величины x_c параметр g оказывается меньше 1. В этих условиях согласно [15] происходит переход металл-изолятор (ПМИ), ниже которого наблюдается закон Эфроса–Шкловского “1/2”: $\ln \sigma \propto -(T_0/T)^{1/2}$, обусловленный со-туннелированием электронов через цепочки “резонансных” гранул. В нашем случае ПМИ наблюдается в образцах с $x < 44$ ат. % (при $x_c \sim 43$ ат. %) (см. [14] и ссылки там). Аналогичное поведение $\sigma(T)$ наблюдалось также нами в пленках НК $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ при изменении x от 56 до 47 ат. % ($x_p \approx 57$ ат. %) [11].

Полученные образцы демонстрируют АЭХ (рис. 1b), который в ферромагнитных материалах определяется СОВ и спиновой поляризацией носителей заряда, пропорциональной намагниченности M образца [1]:

$$\rho_H = R_0 B + 4\pi R_s M \approx 4\pi R_s M, \quad (1)$$

где ρ_H – удельное холловское сопротивление. Первый член в формуле (1) описывает нормальный эффект Холла, пропорциональный магнитной индукции B и обусловленный силой Лоренца; R_0 – константа нормального эффекта Холла. Второй член определяется аномальной компонентой эффекта Холла $\rho_{ANE} = 4\pi R_s M$, которая в ферромагнитных материалах, включая магнитные гранулированные системы [16], обычно является доминирующей $\rho_{ANE} \gg R_0 \cdot B$. Как правило, константа АЭХ R_s степенным образом зависит от продольного удельного сопротивления ρ ($= 1/\sigma$): $R_s \propto \rho^n$, где показатель степени n определяется механизмом АЭХ. При низких температурах, когда $M(T) \approx \text{const}$, $\rho_H \approx \rho_{ANE} = 4\pi R_s M \propto R_s$, т.е. $\rho_H \propto \rho^n$. В этих условиях скейлинг часто выражают через холловскую проводимость: $\sigma_H = \rho_H \sigma^2$, при этом $\sigma_H \propto \sigma^\gamma$ ($\gamma = 2 - n$).

Напомним, что показатель степени n хорошо установлен для однородных ферромагнетиков с металлической проводимостью. При упругом рассеянии носителей заряда (низкие температуры) $n = 1$ для механизма асимметричного рассеяния (skew scattering) и $n = 2$ для механизма бокового смещения при рассеянии (side-jump) и собственного (intrinsic) механизма АЭХ [1]. Однако, с увеличением потенциала примесного рассеяния n уменьшается до $n \approx 0.4$ как в высокоомных ($\rho > 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$) магнитных материалах (так называемых “грязных” металлах) [1, 17], так и в гранулированных системах вблизи перколяционного перехода [11, 16, 18]. Подчеркнем, что существуют, однако, примеры, когда указанный скейлинг не поддерживается как для концентрированных гранулированных сплавов, так и металлических тонкопленочных систем [19–22]. Тем не менее, он выполняется для большинства систем при низких температурах и полезен для изучения доминирующих механизмов АЭХ.

Из данных рис. 1b следует, что в изученных НК поведение намагниченности и АЭХ хорошо коррелируют, насыщаясь в поле $B_s \approx 1 \text{ Тл}$. При этом, величина АЭХ возрастает почти в 2 раза при уменьшении температуры от 200 до 10 К, тогда как намагниченность изменяется не более чем на 5%. Поэтому в нашем случае в полях $> 1 \text{ Тл}$ можно считать, что $\rho_H \propto R_s \propto \rho^n$. Отметим также, что по дан-

ным измерений намагниченности в исследуемых НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ величина $N_d \sim 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, т.е. минимум на порядок меньше, чем в ранее исследованных образцах $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ (оценка N_d получена из наклона $M(T)$ в полях выше 1.5 Тл при $T = 10 \text{ К}$; см. рис. 1б).

Обратимся теперь к скейлинговому поведению холловского сопротивления синтезированных НК образцов. В окрестности порога перколяции удельное сопротивление НК образцов можно одинаково эффективно изменять как путем изменения температуры, так и содержания металла [11]. Так же, как и в [11], для исследованных образцов с содержанием металла $x \approx 40\text{--}48 \text{ ат. \%}$ при варьировании температуры выполняется закон $\rho_{\text{АНЕ}} \propto [\rho(T)]^n$ (рис. 2). При уменьшении x от 48 до 40 ат. % значе-

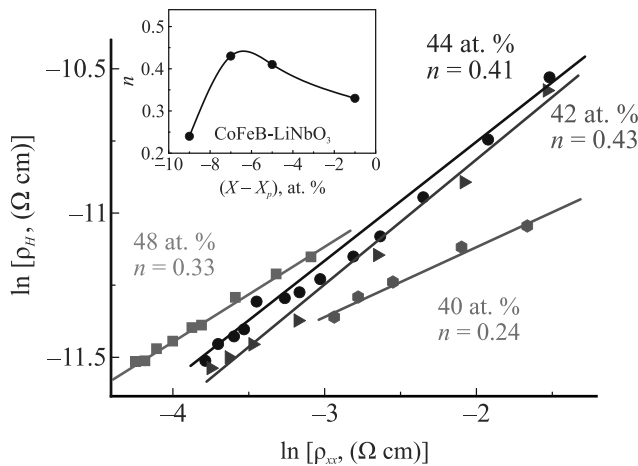


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости холловского сопротивления от продольного сопротивления для образцов с различным фиксированным содержанием металла $x = 40\text{--}48 \text{ ат. \%}$ при варьировании температуры. На вставке – зависимости показателя степени n в законе $\rho_H \propto [\rho(T)]^n$ от содержания металла ниже перколяционного перехода $x_p \approx 49 \text{ ат. \%}$

ние n вначале возрастает от 0.33 до 0.43 при $\Delta x = (x_p - x) = 7 \text{ ат. \%}$ (см. вставку к рис. 2), а затем падает до 0.24 при $\Delta x = 9 \text{ ат. \%}$ (в области перехода в проводимости к закону “1/2”; рис. 1а). В случае НК $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ зависимость $n(x)$ была получена в области логарифмического закона $\Delta x \approx (57\text{--}49) = 8 \text{ ат. \%}$, в котором величина n падает от 0.6 до 0.4 [11], т.е. до той же величины, как и в случае НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$. Обратим внимание, что отмеченное выше немонотонное поведение n от Δx наблюдается в окрестности ПМИ, когда металлическая проводимость массива гранул с сильной туннельной связью между ними (логарифмиче-

ский закон в $\sigma(T)$) трансформируется в активационную туннельную проводимость между отдельными областями резонансно связанных гранул (закон “1/2”) [15]. На языке протяженных кластерных электронных состояний (КЭС) [23], образующихся при большой прозрачности межгранульных туннельных барьеров, ПМИ означает переход от КЭС неограниченных размеров к КЭС конечных размеров, что сопровождается ростом эффективных межгранульных зазоров d_g .

В случае НК с малым содержанием N_d кажется естественным связать наблюдаемый ТАЭХ с приповерхностным барьерным механизмом типа рассмотренного в [9, 10]. Действительно, при очень малых d_g интерфейсный барьер может экранироваться, а эффект Холла нивелироваться, поскольку в узкой диэлектрической прослойке электрон просто не успевает заметно отклониться под действием СОВ. Поэтому уменьшение x и увеличение d_g сопровождается ростом аномальной компоненты эффекта Холла и величины n . Однако при дальнейшем увеличении d_g , когда сопротивление резко возрастает, эта тенденция сменяется на противоположную, т.е. показатель n начинает уменьшаться. Заметим, что при анализе поведения АЭХ в гранулированной системе с сильной туннельной связью между гранулами в рамках моделей асимметричного рассеяния (skew scattering) и бокового смещения (side-jump) внутри гранул было получено значение $n = 0$ [24].

С другой стороны, необходимо иметь в виду, что при изменении продольного сопротивления за счет изменения температуры существенную роль может играть неупругое рассеяние электронов на фононах и/или магнонах, приводя к кардинальной модификации скейлинга [19, 25, 26]. Так в [25] при исследовании АЭХ в $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ на металлической стороне ПМИ ($x \geq 0.05$) были выявлены существенно отличные степенные законы $\rho_{\text{АНЕ}}(T) \propto [\rho(T)]^2$ и $\rho_{\text{АНЕ}}(x) \propto [\rho(x)]^{0.5}$ при изменении температуры и содержания Mn, соответственно. Поэтому невозможно судить о механизме АЭХ только на основании изучения параметрической зависимости $\rho_H \approx \rho_{\text{АНЕ}} \propto [\rho(T)]^n$.

На рисунке 3а представлены зависимости холловского сопротивления ρ_H/x от продольного сопротивления ρ при фиксированных температурах $T = 30, 50, \text{ и } 100 \text{ К}$ и варьировании содержания металлической фазы (следуя [11], при анализе скейлинга мы полагали, что намагниченность образцов $M \propto x$; обоснование необходимости нормировки ρ_H на x см. ниже). Удивительно, что все точки на графике $\rho_{\text{АНЕ}}/x - [\rho(x)]^n$, относящиеся к области перколяционного перехода, где доминирует логарифмический

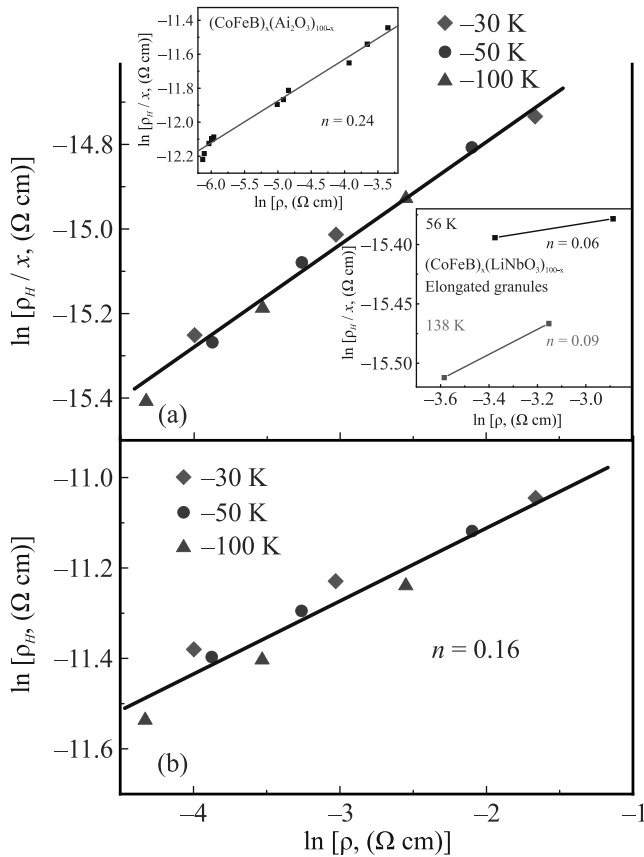


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости холловского сопротивления ρ_H от продольного сопротивления ρ для образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ при вариации содержания металла x в диапазоне $x = 42\text{--}48$ ат. % и фиксированных температурах $T = 30, 50$ и 100 К в координатах: (а) – $\ln(\rho_H/x)$ от $\ln \rho$ и (б) – $\ln \rho_H$ от $\ln \rho$. На верхней вставке для сравнения приведены аналогичные зависимости для образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ из [11] при фиксированных T из диапазона $10\text{--}36$ К. На нижней вставке для сравнения приведены аналогичные зависимости при $T = 56$ К и $T = 138$ К для образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с вытянутыми гранулами из [12]

закон $\sigma \propto \ln T$, ложатся на одну прямую с наклоном $n \approx 0.24$. При этом полученная величина n с точностью $\sim 5\%$ совпадает со значением n для системы $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ с округлыми гранулами и высоким содержанием диспергированных атомов Со и Fe [11] (см. верхнюю вставку на рис. 3а). Однако, сильно превосходит оценку n (в 3–4 раза) для НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с сильно вытянутыми гранулами [12] (нижняя вставка на рис. 3а). Интересно также отметить, что данное значение $n \approx 0.24$ хорошо совпадает со значением степени, найденной при варьировании температуры по зависимости $\rho_{\text{АНЕ}}$ от $[\rho(T)]^n$ для образца $x \approx 40$ ат. % (закон “1/2” в $\sigma(T)$),

хотя для образцов с x из области логарифмического закона $\sigma(T)$ этот параметр заметно выше ($n = 0.33\text{--}0.43$; см. рис. 2).

Можно показать, что нормировка на x при анализе скейлинга в поведении $\rho_{\text{АНЕ}}$ от ρ путем варьирования содержания металла весьма желательна в тех случаях, когда удельное сопротивление изучаемых образцов изменяется в разы при относительно слабом изменении сопротивления АЭХ (т.е. ожидается показатель степени n , заметно меньший 1). Действительно, увеличение n при нормировке ρ_H на x в диапазоне $x = 40\text{--}48$ ат. % составляет $n = n_0 + \ln(48/40)/\ln(\rho_{40}/\rho_{48}) \approx n_0 + 0.18/\ln(\rho_{40}/\rho_{48})$, где n_0 – показатель в отсутствие нормировки, а ρ_{40} и ρ_{48} – удельные сопротивления НК пленок при 40 и 48 ат. % соответственно. Иными словами, при изменении $\ln \rho$ в пределах 2 (см. рис. 3а), наклон в зависимости $\ln \rho_H$ от $\ln \rho$ должен уменьшиться на величину ~ 0.1 , что наблюдается экспериментально (см. рис. 3б). Важно отметить, что при нормировке заметно улучшается качество подгонки экспериментальных данных линейной функцией (относительное среднеквадратичное отклонение составляет 4.4 и 9.7 % для скейлинговых зависимостей на рис. 3а и б соответственно).

Напомним, что наблюдение закона “1/2” в проводимости исследованных НК мы связываем с прыжковой проводимостью и эффектами сотуннелирования электронов через цепочки гранул, причем в магнетосопротивлении данные эффекты проявляются и в образцах с $x = 44\text{--}48$ ат. %, в которых наблюдается логарифмический закон в $\sigma(T)$ [14]. Это обстоятельство наводит на мысль об ином источнике ТАЭХ, связанном с коррелированным изменением вероятности туннельных переходов в совокупности магнитных центров под действием СОВ [27]. В теории этот случай хорошо изучен для разбавленных перколяционных систем с изолированными магнитными примесями, когда для описания эффекта Холла достаточно рассмотреть тройки центров и учесть эффекты прямого и непрямого (второго порядка через промежуточное состояние) туннелирования [28]. При этом в продольной проводимости таких систем доминируют процессы прямого туннелирования (первого порядка). Однако в случае НК с плотно упакованными магнитными гранулами это нарушается [11, 12]; закон “1/2” в этом случае удается непротиворечивым образом объяснить с привлечением представлений о со-туннелировании, т.е. процессах туннелирования высокого порядка [15] (см. также [14] и ссылки там). Влияние СОВ на холловскую проводимость НК в

этих условиях, насколько нам известно, не изучалось. Формально из различных режимов прыжковой проводимости в примесных магнитных полупроводниках, рассмотренных в [28], к нам наиболее близок случай переноса при наличии кулоновской щели, когда в проводимости также выполняется закон “ $1/2$ ”. В этом случае согласно [28]: $\gamma = 1.33\text{--}1.62$, что соответствует $n = 0.67\text{--}0.38$ (в пионерской работе [27] получена степень $n = 0.5$), т.е. с точностью до коэффициента $\approx 1.5\text{--}2.5$ совпадает с найденным в эксперименте скейлинговым параметром $n \approx 0.24$.

Наблюдаемое расхождение теоретических предсказаний для скейлинга АЭХ в случае систем с изолированными примесями в режиме прыжкового переноса [27, 28] с полученным нами скейлингом для НК из плотно упакованных гранул мы связываем с принципиально разным характером транспорта в данных системах. В первом случае АЭХ отсутствует при переходе электрона с одного примесного центра на другой, и именно поэтому привлекается коррелированный переход между тремя примесными центрами, который только условно можно считать со-туннелированием. Между тем, в гранулированной системе АЭХ возникает при туннелировании между двумя гранулами, а в случае со-туннелирования и при туннелировании через цепочки гранул, не обязательно через тройки гранул. Для такого процесса со-туннелирования теория АЭХ не разработана, а процесс усреднения по тройкам примесных центров, используемый в работах [27, 28], к со-туннелированию в гранулированных системах неприменим.

Таким образом, наблюдение универсального скейлинга $\rho_{ANE}/x \propto [\rho(x)]^{0.24}$ в поведении холловского сопротивления от продольного в НК на базе аморфных матриц Al_2O_3 и LiNbO_3 с существенно различными ширинами запрещенной зоны (отличаются в 1.5 раза) и, соответственно, межгранульными барьерами указывает на доминирующую роль механизма ТАЭХ, связанного с коррелированным изменением вероятности туннельных переходов в совокупности из более 3-х магнитных гранул под действием СОВ, типа рассмотренного в [27, 28] для систем с изолированными магнитными примесями. Так как найденный скейлинг с $n \approx 0.24$ наблюдается в достаточно широкой области составов ниже порога перколяции, то это указывает на то, что процессы со-туннелирования становятся уже существенны для АЭХ даже когда они не проявляются в продольной проводимости при сильной туннельной связи между гранулами. Вместе с тем не следует полностью исключать рассмотренный выше интерфейсный барьерный механизм ТАЭХ [9, 10], позволяющий ка-

чественно объяснить немонотонную концентрационную зависимость показателя скейлинга n , полученного путем изменения температуры: $\rho_{ANE} \propto [\rho(T)]^n$ (рис. 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 22-29-00392) с использованием оборудования Ресурсного Центра НИЦ “Курчатовский институт”.

1. N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
2. J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).
3. H. Wang, Y. Dai, G.-M. Chow, and J. Chen, *Prog. Mater. Sci.* **130**, 100971 (2022).
4. L. Šmejkal, A. H. MacDonald, J. Sinova, S. Nakatsuji, and T. Jungwirth, *Nat. Rev. Mater.* **7**, 482 (2022).
5. L. Šmejkal, J. Sinova, S. Nakatsuji, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. X* **12**, 040501 (2022).
6. S. A. Tarasenko, V. I. Perel, and I. N. Yassievich, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 056601 (2004).
7. A. Vedyayev, N. Ryzhanova, N. Strelkov, and B. Dieny, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 247204 (2013).
8. A. V. Vedyayev, M. S. Titova, N. V. Ryzhanova, M. Y. Zhuravlev, and E. Y. Tsymbal, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 032406 (2013).
9. A. Matos-Abiague and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 056602 (2015).
10. Е. А. Караштин, Н. С. Гусев, И. Ю. Пашенькин, М. В. Сапожников, А. А. Фраерман, *ЖЭТФ* **163**, 5 (2023).
11. V. V. Rylkov, S. N. Nikolaev, K. Yu. Chernoglazov, V. A. Demin, A. V. Sitnikov, M. Yu. Presnyakov, A. L. Vasiliev, N. S. Perov, A. S. Vedeneev, Yu. E. Kalinin, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, *Phys. Rev. B* **95**, 144202 (2017).
12. В. В. Рыльков, С. Н. Николаев, В. А. Демин, А. В. Емельянов, А. В. Ситников, К. Э. Никируй, В. А. Леванов, М. Ю. Пресняков, А. Н. Талденков, А. Л. Васильев, К. Ю. Черноглазов, А. С. Веденеев, Ю. Е. Калинин, А. Б. Грановский, В. В. Тугушев, А. С. Бугаев, *ЖЭТФ* **153**, 424 (2018).
13. Е. В. Кучис, *Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования*, Радио и связь, М. (1990), 264 с.
14. С. Н. Николаев, К. Ю. Черноглазов, А. В. Емельянов, А. В. Ситников, А. Н. Талденков, Т. Д. Пацаев, А. Л. Васильев, Е. А. Ганышина, В. А. Демин, Н. С. Аверкиев, А. Б. Грановский, В. В. Рыльков, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 46 (2023).
15. I. S. Beloborodov, A. V. Lopatin, V. M. Vinokur, and K. B. Efetov, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 469 (2007).
16. A. Pakhomov, X. Yan, and B. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3497 (1995).

17. S. Onoda, N. Sugimoto, and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **77**, 165103 (2008).
18. Б. А. Аронзон, Д. Ю. Ковалев, А. Н. Лагарьков, Е. З. Мейлихов, В. В. Рыльков, М. В. Седова, N. Negre, M. Goiran, J. Leotin, Письма в ЖЭТФ **70**, 87 (1999).
19. А. В. Ведряев, А. Б. Грановский, О. А. Котельникова, *Кинетические явления в неупорядоченных ферромагнитных сплавах*, изд-во МГУ, М. (1992).
20. А. В. Ведряев, А. Б. Грановский, А. В. Калицов, Ф. Брауэрс, ЖЭТФ **112**, 2198 (1997).
21. Y. Tian, L. Ye, and X. Jin, Phys. Rev. Lett. **103**, 087206 (2009).
22. D. Hou, G. Su, Y. Tian, X. Jin, S. A. Yang, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **114**, 217203 (2015).
23. Л. В. Луцев, М. Н. Копытин, А. В. Ситников, О. В. Стогней, ФТТ **47**, 2080 (2005).
24. H. Meier, M. Y. Kharitonov, and K. B. Efetov, Phys. Rev. B **80**, 045122 (2009).
25. X. Liu, S. Shen, Z. Ge, W. L. Lim, M. Dobrowolska, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. B **83**, 144421 (2011).
26. A. Shitade, and N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 083704 (2012).
27. A. V. Vedyayev and A. B. Granovsky, Sov. Phys. Solid State **28**, 1293 (1986).
28. X.-J. Liu, X. Liu, and J. Sinova, Phys. Rev. B **84**, 165304 (2011).

Сравнение щелевой структуры сверхпроводящих пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ недо- и передопированного состава

Т. Е. Кузьмичева⁺¹⁾, С. А. Кузьмичев^{*+}, К. С. Перваков⁺, В. А. Власенко⁺

⁺ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^{*} Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 июня 2023 г.

После переработки 5 сентября 2023 г.

Принята к публикации 5 сентября 2023 г.

В работе проведено сравнение структуры сверхпроводящего параметра порядка передопированных $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ и недодопированных пниктидов $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ с близкими $T_c \approx 18.0\text{--}18.3\text{ К}$. С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андreeвских отражений напрямую определены величины двух микроскопических сверхпроводящих параметров порядка – малой сверхпроводящей щели и предположительно анизотропной большой щели, их характеристические отношения и температурные зависимости. Обсуждаются сходства и различия щелевой структуры и возможное влияние близости антиферромагнитной фазы на сверхпроводящие свойства.

DOI: 10.31857/S1234567823190096, EDN: xrlnoi

1. Введение. В стехиометрических слоистых пниктидах BaFe_2As_2 (так называемое семейство Ва-122) при понижении температуры до $T_m \approx 138\text{ К}$ устанавливается дальний антиферромагнитный (АФМ) порядок с волной спиновой плотности, сопровождаемый структурным переходом из тетрагональной в орторомбическую фазу. При частичном электронном замещении $\text{Fe}_{2-x}\text{Ni}_x$ АФМ подавляется, и возникает сверхпроводящее (СП) состояние [1]. В области оптимального допирования ($x \approx 0.1$) критическая температура достигает $T_c \approx 21\text{ К}$. На поверхности Ферми электронно-допированных пниктидов Ва-122 с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) обнаружены дырочные цилиндры около Г-точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около М-точки, на которых ниже T_c могут открываться несколько СП щелей [2]. Теоретически предложено два основных механизма образования куперовских пар посредством спиновых флуктуаций (так называемая $s^\pm$ -модель) [3] и орбитальных флуктуаций (s^{++} -модель) [4]. Щелевая структура системы Ва-122 была рассчитана теоретически в рамках этих моделей в работе [5].

Измерения скорости ядерной спин-решеточной релаксации $1/T_1T(T)$ от температуры в монокристаллах родственных соединений $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ с $x = 0\text{--}0.52$ [6, 7] показали ее заметное падение при увеличении x , что соответствует уменьшению интен-

сивности спиновых флуктуаций с увеличением степени электронного допирования. Однако, влияние близости АФМ фазы именно на СП свойства пниктидов семейства Ва-122 до сих пор дискутируется. На данный момент исследования щелевой структуры $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ крайне немногочисленны: в частности, данные о щелевой структуре образцов с $x = 0.12$ отсутствуют. Хотя большинство исследователей наблюдает двухщелевую СП в $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ [8–10], в имеющихся работах присутствует значительный разброс оцененных характеристических отношений СП параметров порядка (например, для большой СП щели $2\Delta_L(0)/k_B T_c \approx 3.7\text{--}13$, т.е. варьируется в 3.5 раза), вызванный, вероятнее всего, отсутствием прямых измерений. Данные об эволюции щелевой структуры $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ вдоль фазовой диаграммы допирования на данный момент не обсуждались в литературе.

В работе впервые проведено сравнение СП свойств $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ недо- и передопированных составов ($x = 0.08, 0.12$, соответственно) с близкими критическими температурами $T_c \approx 18.0\text{--}18.3\text{ К}$: количества и величин СП щелей, их характеристических отношений и температурных зависимостей. Обсуждается отсутствие значительного влияния АФМ фазы на СП свойства и щелевую структуру пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ при электронном допировании.

2. Экспериментальный метод. Крупные монокристаллы недодопированного (НД) состава $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ и передопированного (ПД) состава

¹⁾ e-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

$\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ размерами до 1 см были выращены методом “раствор в расплаве” (подробнее см. [11–13]). Характеризация методами рентгеновской дифракции, электронной микроскопии и магнитных измерений показали наличие единственной СП фазы. Содержание никеля и элементный состав монокристаллов были определены методом энергодисперсионной спектроскопии с помощью приставки INCA X-Act для сканирующего электронного микроскопа JEOL 7001F с катодом с полевой эмиссией. Фактическое содержание никеля в образце с $x = 0.08$ составило 0.078 ± 0.004 , а для образца с $x = 0.12$ составило 0.115 ± 0.007 .

На рисунке 1 видно, что НД кристаллы $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ демонстрируют понижение сопротивления с увеличением температуры при $T > T_c$, предшествующее АФМ и структурному переходу. Напротив, для ПД состава $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ структурный и АФМ переходы отсутствуют, а выше T_c наблюдается рост $R(T)$, характерный для металлов. Ширина резистивных СП переходов исследованных образцов не превышает 0.7 К, что говорит о высокой степени однородности выращенных кристаллов.

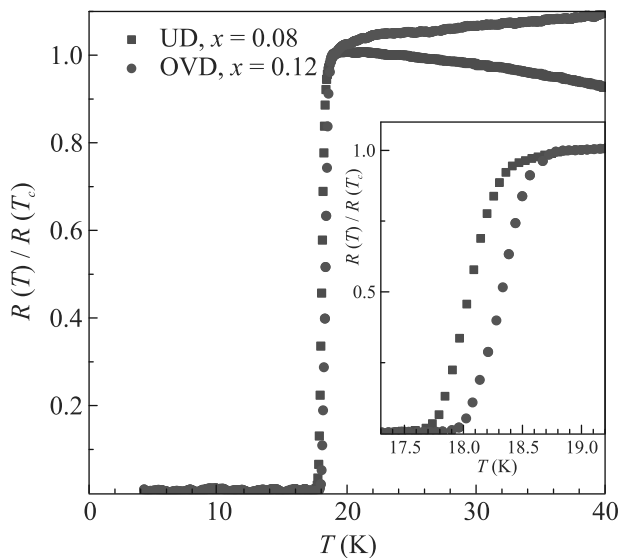


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости сопротивления монокристаллов НД состава $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ и ПД состава $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$. На вставке увеличена область СП перехода

Для туннельных исследований с помощью техники “break-junction” [14] в монокристаллах создавались планарные механически регулируемые наноконтакты типа сверхпроводник–тонкий нормальный металл–сверхпроводник (SnS) с направлением протекания тока вдоль оси c . Пытаясь подойти к вопро-

су внутренней структуры получаемых контактов не формально, по виду вольтамперной характеристики (ВАХ), а спекулятивно, то с учетом созданной в образце трещины можно предположить, что эта структура соответствует SnInS (где I – тонкий изолятор с достаточно высокой прозрачностью), причем S и n -области с двух сторон эквивалентны, поскольку получены раскалыванием одного и того же кристалла. Области, играющими роль нормального металла, может служить не физически образовавшийся зазор, а появившаяся после раскалывания поверхность СП, потерявшая по каким-то причинам СП свойства. Геометрия получаемых контактов в слоистых монокристаллах, конфигурация, преимущества и недостатки методики подробно описаны в обзоре [15]. Физическая модель контакта схематически приведена на рис. 1 в [16]. В соответствии с предполагаемой моделью контакта, механическая регулировка изменяет его площадь в ab -плоскости и, соответственно, нормальное сопротивление R_N .

Используемый метод спектроскопии основан на эффекте некогерентных многократных андреевских отражений (MAO), имеющем место в SnS-контакте размером $\xi < d < l$ (ξ – длина когерентности, d – поперечник контакта, l – характерная длина неупругого рассеяния) ниже T_c . В случае высокой прозрачности NS-интерфейсов (безразмерный барьерный параметр $Z \lesssim 0.3$) некогерентный андреевский транспорт вызывает на ВАХ SnS-контакта избыточный ток (относительно нормальной ВАХ выше T_c) при любых смещениях eV . При $eV = 0$ сверхтоковая ветвь на ВАХ отсутствует, вместо нее наблюдается участок повышенной в разы (однако, конечной) проводимости по сравнению с нормальной проводимостью G_N контакта (так называемая область пьедестала) [17, 18]. На соответствующем $dI(V)/dV$ -спектре возникает серия минимумов субгармонической целевой структуры (СГС), положение которых $|eV_n(T)| = 2\Delta(T)/n$ ($n = 1, 2, \dots$) напрямую определяется величиной СП щели Δ при любых температурах вплоть до T_c [17–21]. Число n^* наблюдаемых минимумов СГС в планарном SnS-контакте и отношение его андреевской проводимости при нулевом смещении G_{ZBC}^A к G_N примерно соответствует величине отношения l_c/d_c в c -направлении [18, 21]. Для многощелевого СП на $dI(V)/dV$ -спектре будут присутствовать СГС от каждой щели.

При баллистическом пролете квазичастиц через SnS-контакт в ab -плоскости (т.е. при $l_{ab}^{el} > d_{ab}$ (l_{ab}^{el} – длина свободного пробега) k_x и k_y -компоненты их импульса должны сохраняться. Это дает возможность получать информацию об анизотропии сверх-

проводящей щели в $k_x k_y$ -плоскости. В то же время, k_z -компонента может не сохраняться из-за “перемешивания” носителей вдоль направления тока вследствие неупругого рассеяния.

Тип симметрии СП щели $\Delta(\theta)$ (θ – угол в $k_x k_y$ -плоскости импульсного пространства) может быть косвенно оценен по форме андреевских минимумов в рамках подхода [22], как показано на рис. 4 в [15]. Для СП параметра порядка с s -волновым типом симметрии ожидаются резкие интенсивные андреевские минимумы, в то время как СГС с сильно подавленной амплитудой должна гипотетически наблюдаться в случае параметра порядка, имеющего точки нулей (“ноды”). Для СП щели с расширенной s -волновой симметрией без нулей в угловом распределении ожидаются протяженные особенности – дублеты, ширина которых определяется максимальной Δ^{out} и минимальной Δ^{in} энергиями связи куперовских пар в k -пространстве. Степень анизотропии далее определена как $A \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta^{\text{in}}/\Delta^{\text{out}}]$.

Суммируя вышесказанное, МАО-спектроскопия планарных контактов с баллистическим транспортом на микротрещине позволяет локально (в пределах контактной области размером порядка десятков нм) и напрямую определять амплитуды, характеристические отношения и температурные зависимости СП параметров порядка в высоком разрешении (≈ 0.05 мэВ), а также оценивать их возможную анизотропию в $k_x k_y$ -плоскости [15].

3. Экспериментальные данные. На рисунке 2 приведены ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектры SnS-контакта в образце ПД состава ($x = 0.12$), измеренные ниже и выше $T_c \approx 18$ К. Зависимости $I(V)$ симметричны относительно $eV = 0$, не имеют гистерезиса и сверхтоковой ветви, что исключает как джозефсоновскую природу наблюдаемых особенностей, так и существование прямого контакта между СП берегами, т.е. СП шунта. Напротив, при $T = 4.2$ К $< T_c$ ВАХ (красная кривая на рис. 2) имеет избыточный ток (относительно нормальной $I(V)$ при $T \approx 19.1$ К $> T_c$, показанной серой кривой) во всем диапазоне смещений eV , зависимость которого от напряжения $I_{\text{exc}}(V)$ показана на вставке. В то же время, в СП состоянии на $dI(V)/dV$ -спектрах хорошо виден “пьедастал” при $eV \rightarrow 0$ и серия андреевских минимумов. Данные особенности ВАХ и $dI(V)/dV$ воспроизводятся для полученных нами контактов и соответствуют реализации некогерентного режима МАО и достаточно высокой прозрачности SnS-контакта согласно всем имеющимся теоретическим моделям МАО [17, 18, 20, 21].

Расчет, аналогичный проведенному в работе [23], позволяет оценить длину свободного пробега $l_{ab}^{\text{el}} \approx$

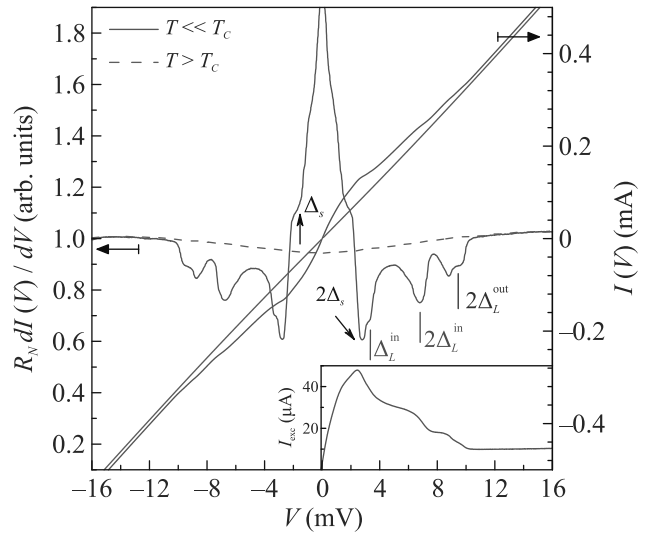


Рис. 2. (Цветной онлайн) ВАХ (правая вертикальная ось) и $dI(V)/dV$ -спектр (левая ось) SnS-контакта с $T_c \approx 18$ К, полученного в $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$, при температурах 4.2 и 19.1 К. Вертикальными линиями отмечены фундаментальные минимумы (дублет), определяющие энергетические щелевые параметры $\Delta_L^{\text{out}} \approx 4.6$ мэВ и $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.3$ мэВ, стрелками показаны первая и вторая субгармоники от малой СП щели $\Delta_S \approx 1.4$ мэВ. На вставке приведен избыточный андреевский ток $I_{\text{exc}}(V) \equiv I(V, 4.2 \text{ К}) - I(V, 19.1 \text{ К})$

87 нм для исследованных монокристаллов, а также, используя нормальные сопротивления полученных SnS-контактов $R_N \approx 15\text{--}60$ Ом (рис. 2, 3), оценить их диаметр $d_{ab} \approx 68\text{--}34$ нм, соответственно. Таким образом, отношение $l_{ab}^{\text{el}}/d_{ab} \approx 1.3\text{--}2.5$ дает возможность наблюдать зависимость СП параметров порядка от направления импульса. Отношение длины неупругого рассеяния к поперечнику контакта вдоль c -направления можно оценить по величине отношения G_{ZBC}^A/G_N и числу наблюдаемых минимумов СГС как $l_c/d_c \approx 1\text{--}2$ (см. рис. 2, 3). В то же время, поскольку обычно длина неупругого рассеяния l превышает l^{el} на 1–2 порядка величины, а длина когерентности $\xi_c \approx 1.2$ нм мала в сверхпроводниках семейства Ва-122 с электронным замещением [24], можно оценить $\xi_c \ll d_c \leq l_c$, что означает отсутствие фазовой когерентности в процессе МАО для представленных SnS-контактов.

$dI(V)/dV$ -спектр выше T_c (серая кривая на рис. 2) демонстрирует слабую нелинейность, воспроизводимо наблюдаемую нами в $\text{Ba}(\text{Fe}, \text{Ni})_2\text{As}_2$ и обсуждаемую в [25, 26]. Ниже T_c на фоне этой нелинейности появляются андреевские особенности. Отметим, что нормальная проводимость контакта при $eV \gg 2\Delta$ не меняется с температурой, что говорит о неизменности площади контакта и его ме-

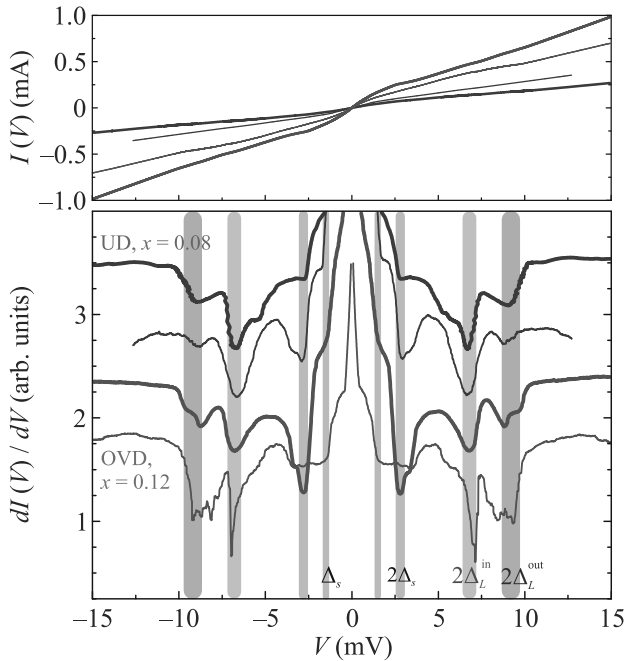


Рис. 3. (Цветной онлайн) Вольтамперные характеристики (верхняя панель) и соответствующие $dI(V)/dV$ -спектры SnS-контактов при $T = 4.2$ К (нижняя панель) в монокристаллах НД состава ($x = 0.08$, кривые зеленого цвета) и ПД состава $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ ($x = 0.12$, кривые красного цвета) с близкими $T_c \approx 18.0 - 18.3$ К. Вертикальными линиями отмечены андреевские минимумы от СП энергетических параметров $\Delta_L^{\text{out}} \approx 4.6$ мэВ, $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.3$ мэВ, $\Delta_S \approx 1.4$ мэВ. Спектры сдвинуты по вертикали на произвольную величину для удобства сравнения

ханической стабильности, а также о баллистическом режиме транспорта и, следовательно, отсутствии перегрева контактной области из-за отсутствия в ней рассеяния.

При 4.2 К на смещениях $|eV| \approx 9.2$ мэВ и $|eV| \approx 6.6$ мэВ наблюдаются минимумы, положения которых не соответствуют формуле для СГС для субгармоник порядка $n = 1, 2$ или $n = 2, 3$. При больших смещениях $dI(V)/dV$ -спектр гладкий и не имеет особенностей, т.е. соответствует внещелевой области энергий, где мощные пики плотности электронных состояний отсутствуют. Два вышеназванных минимума, по всей вероятности, образуют дублет фундаментальной андреевской гармоник ($n = 1$) и напрямую определяют два энергетических параметра $\Delta_L^{\text{out}} \approx 4.6$ мэВ и $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.3$ мэВ. Основываясь на форме арки, связывающей минимумы дублета, которая соответствует численным расчетам на рис. 4 в [15], можно предположить реализацию в этом соединении анизотропной большой СП щели с расширенным s -волновым типом симметрии и отсутствием точек ну-

лей в $k_x k_y$ -плоскости. Параметры Δ_L^{out} и Δ_L^{in} в этом случае являются максимальной и минимальной энергиями связи куперовских пар для соответствующих направлений в импульсном пространстве. С другой стороны, принимая во внимание отсутствие теоретических расчетов формы андреевских особенностей для СП с анизотропной щелью в рамках подходов [17, 19, 20], мы не можем напрямую исключить реализацию двух независимых изотропных СП щелей с амплитудами Δ_L^{out} и Δ_L^{in} , открывающихся ниже T_c на различных листах поверхности Ферми.

При меньших смещениях $|eV| \approx 2.8$ и 1.4 мэВ присутствуют минимумы ($2\Delta_S$, Δ_S , черные стрелки на рис. 2), которые могут быть интерпретированы как $n = 1, 2$ андреевские особенности от малой щели $\Delta_S \approx 1.4$ мэВ. Для Δ_S четкие дублеты на $dI(V)/dV$ -спектрах нами воспроизводимо не наблюдаются, что может быть следствием либо изотропности Δ_S , либо уровнем ее анизотропии $A_S > 50\%$, вплоть до наличия нулей в $k_x k_y$ -плоскости.

Для сравнения щелевой структуры образцов НД и ПД состава с близкими $T_c \approx 18.0 - 18.3$ К на рис. 3 показаны ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектры SnS-контактов при 4.2 К. Данные по контакту с рис. 2 показаны на рис. 3 жирными красными кривыми. На спектрах воспроизводимо наблюдается предполагаемый дублет от большой СП щели, а также СГС от малой СП щели. Определенные напрямую энергетические величины $\Delta_L^{\text{out}}(0)$, $\Delta_L^{\text{in}}(0)$ и $\Delta_S(0)$ практически совпадают для НД и ПД составов. Также отметим, что все наблюдаемые особенности $dI(V)/dV$ не могут быть вызваны геометрическими резонансами, поскольку их положения не зависят от нормального сопротивления контакта (здесь $R_N \approx 15 - 60$ Ом, которое может быть оценено по наклону ВАХ при $eV \gg 2\Delta_L(0)$).

Температурная эволюция $dI(V)/dV$ -спектра SnS-контакта с рис. 2 в образце ПД состава показана на рис. 4а. С увеличением температуры андреевские минимумы становятся менее интенсивными, а их положение смещается в сторону нуля, в соответствии с зависимостями $\Delta_i(T)$. Убывает также проводимость при нулевом смещении, при этом $G_N(T, eV \gg 2\Delta) \approx \text{const.}$ При $T \approx 18.3$ К $> T_c$ на ВАХ (серая линия на рис. 2) и $dI(V)/dV$ -спектре (штриховая линия на рис. 4а) отсутствуют особенности, вызванные андреевским транспортом, спектр в целом сглаживается, что соответствует переходу контактной области в нормальное состояние.

По данным рис. 4а напрямую определены температурные зависимости энергетических щелевых параметров $\Delta_L^{\text{out}}(T)$, $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ (сплошные кружки) и $\Delta_S(T)$ (открытые кружки) на рис. 4б. Степень пред-

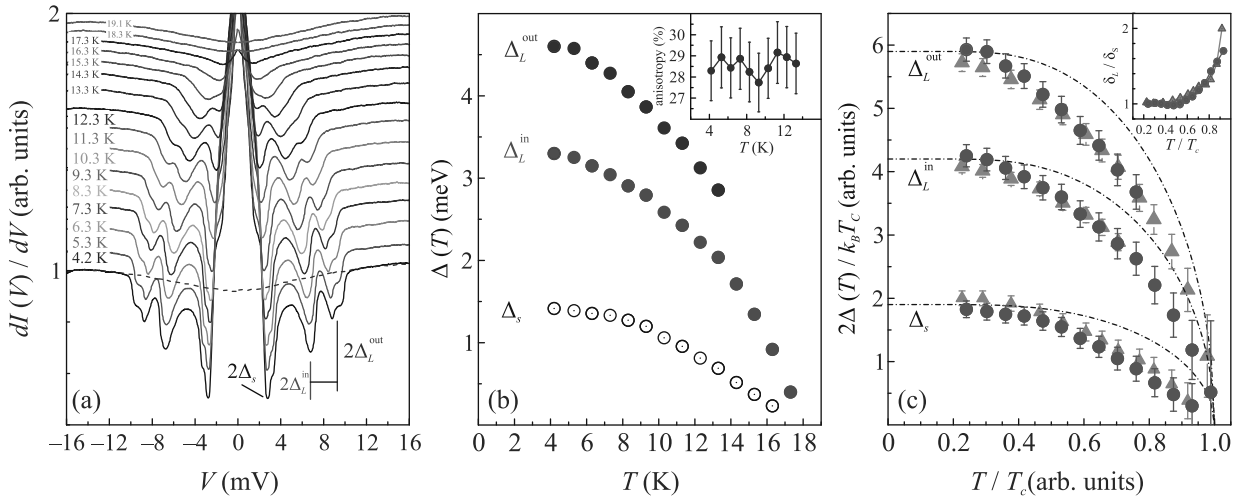


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Эволюция $dI(V)/dV$ -спектра SnS-контакта в кристалле ПД состава ($x = 0.12$) с температурой. Кривые вручную сдвинуты по вертикали для удобства. Спектр при $T = 19.1$ К $> T_c$ (без сдвига) приведен штриховой линией для демонстрации неизменности нормальной проводимости контакта с температурой. Вертикальными линиями отмечены фундаментальные андреевские гармоники от Δ_L^{out} , Δ_L^{in} , Δ_S при $T = 4.2$ К. (б) – Температурные зависимости СП щелевых параметров $\Delta_i(T)$, полученные по данным (а). На вставке приведена температурная зависимость предположительной анизотропии большой СП щели $A_L = 100\% \cdot [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}]$. (с) – Сравнение нормированных температурных зависимостей $2\Delta_i(T)/k_B T_c$ для $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ПД состава ($x = 0.12$, кружки красного цвета, по данным (а), (б)) и НД состава ($x = 0.08$, треугольники зеленого цвета, данные взяты из [23]). Для сравнения показаны однозонные БКШ-образные функции (штрихпунктирные линии). На вставке соответствующими символами показаны зависимости отношений $\delta_L^j(T)/\delta_S(T)$ ($\delta(T) \equiv \Delta(T)/\Delta(0)$, $j = \text{out}, \text{in}$) для НД и ПД состава от температуры

положительной анизотропии Δ_L составляет $A_L(T) \approx 28\%$ и практически не меняется с температурой, как показано на вставке. Другими словами, зависимости, отмеченные как $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{out}}(T)$, повторяют друг друга с точностью выше 1%. На рисунке 4с те же зависимости $\Delta_{L,S}(T)$ для образца с $x = 0.12$ (красные кружки) приведены в нормированном на T_c виде в сравнении с зависимостями, полученными нами ранее [23] в образце с $x = 0.08$ (локальная критическая температура контакта $T_c \approx 18.3$ К, зеленые треугольники). Видно, что абсолютные значения и форма кривых схожа для $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ как НД, так и ПД составов с близкими T_c . В целом, полученные $\Delta_{L,S}(T)$ типичны для многощелевого сверхпроводника с умеренным межзонным взаимодействием, сравнимым по силе с внутризонным.

Несмотря на кажущееся сходство температурных зависимостей СП параметров порядка, вблизи T_c малая СП щель закрывается быстрее: как показано на вставке к рис. 4с, отношение $\delta_L(T)/\delta_S(T)$ ($\delta_i(T) \equiv \Delta_i(T)/\Delta_i(0)$, где $i = L, S$) увеличивается для каждого из составов примерно в два раза при повышении температуры. Таким образом, поведение $\delta_S(T)$ существенно отличается от $\delta_L(T)$, а андреевские минимумы при $eV \approx 2.8$, 1.4 мэВ при 4.2 К не могут быть интерпретированы как субгармоники высоких

порядков от Δ_L . Следовательно, малая щель Δ_S является характерной энергией связи второго типа куперовских пар, а соответствующий СП параметр порядка открывается на других (по сравнению с Δ_L) листах поверхности Ферми.

4. Обсуждение. Напрямую определенные величины СП щелевых параметров – предположительные экстремумы углового распределения большой СП щели Δ_L^{out} и Δ_L^{in} , а также малой СП щели Δ_S при $T \ll T_c$ практически одинаковы для $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ и $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ (см. рис. 3). Их характеристические отношения $r_i \equiv 2\Delta_i(0)/k_B T_c$ составляют $r_L^{\text{out}}(0) \approx 5.9$, $r_L^{\text{in}}(0) \approx 4.3$ и $r_S(0) \approx 1.8$ и близки к соответствующим r_i , полученным нами ранее в $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ сильно передопированного ($x = 0.14$) состава с $T_c \approx 12$ К и оптимально допированного состава с $T_c \approx 20$ К [25, 26], а также в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ родственного семейства 1144 [27]. Величина r_S оказалась ниже предела слабой связи 3.5 теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), что характерно для “ведомого” конденсата в многощелевом сверхпроводнике. Температурные зависимости СП щелей и предположительной анизотропии большой СП щели $A_L(T) \approx 28\% \approx \text{const}$ также схожи в исследованных НД и ПД составах с $x = 0.08$, 0.12 (см. рис. 4с).

В рамках “чистого” s^{++} -взаимодействия, согласно расчетам [5], трудно получить сильную анизотропию СП щели в $k_x k_y$ -плоскости; при этом $A > 20\%$ и тем более наличие нулей в распределении $\Delta(\theta)$ могут быть достигнуты при введении $s^\pm$ -взаимодействия как дополнительного канала образования куперовских пар. Полагая, что наблюдаемые нами дублеты на $dI(V)/dV$ -спектрах вызваны $A_L \approx 28\%$ анизотропией большой СП щели, можно судить о наличии спин-флуктуационного канала в механизме СП спаривания $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. Тем не менее, мы не наблюдаем заметного изменения целевой структуры, величин СП щелей и количества СП конденсатов, соответствующих характеристических отношений, а также предположительной анизотропии Δ_L , т.е. зависимости энергии связи куперовских пар этого типа от угла $\Delta_L(\theta)$ в ПД области по сравнению с НД составом ($T_c \approx 18\text{--}20\text{ K}$). Таким образом, можно предположить, что близость АФМ фазы практически не меняет структуру СП параметра порядка в $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ слабо НД состава $x = 0.08$ по сравнению с ПД составом $x = 0.12$. Это является важным экспериментальным фактом и ставит вопрос о влиянии соответствующего ослабления интенсивности спиновых флуктуаций с допированием, показанного в работах [6, 7], на СП свойства системы Ва-122 с электронным замещением.

5. Заключение. Определена структура СП параметра порядка пниктидов $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ слабо передопированного состава и проведено ее сравнение с целевой структурой $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ слабо недодопированного состава с близкими $T_c \approx 18\text{ K}$. Мы не наблюдаем заметного изменения целевой структуры в НД кристаллах по сравнению с ПД областью фазовой диаграммы. Напрямую измеренные для образцов ПД состава величины трех СП параметров порядка – малой СП щели и экстремумов предположительно анизотропной большой СП щели (расширенный s -волновой тип симметрии без нодов), их характеристические отношения $2\Delta_L(0)/k_B T_c \approx 4.3\text{--}5.9$ (диапазон соответствует предположительной анизотропии щели $A_L \approx 28\%$ в k -пространстве) и $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 1.8$ и температурные зависимости практически идентичны таковым в НД кристаллах.

Схожесть величин СП параметров порядка и формы их температурных зависимостей $\Delta_i(T)$ для двух составов указывает на то, что близость АФМ фазы практически не влияет на целевую структуру, силу и возможную анизотропию СП спаривания для пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ в диапазоне электронного замещения $x = 0.08\text{--}0.12$ и $T_c \geq 18\text{ K}$.

Авторы благодарят М. М. Коршунова, Ю. А. Алещенко и В. М. Пудалова за полезные обсуждения. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема “Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов”, # 0023-2019-0005). Измерения частично проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

1. X. Lu, *Phase Diagram and Magnetic Excitations of $\text{BaFe}_{2x}\text{Ni}_x\text{As}_2$: A Neutron Scattering Study*, Springer Theses (2017); DOI:10.1007/978-981-10-4998-9.
2. S. Ideta, T. Yoshida, I. Nishi et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **110**, 107007 (2013).
3. I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, M. H. Du, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 057003 (2008).
4. H. Kontani and S. Onari, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 157001 (2010).
5. T. Saito, S. Onari, and H. Kontani, *Phys. Rev. B* **88**, 045115 (2013).
6. F. Ning, K. Ahilan, T. Imai, A. S. Sefat, R. Jin, M. A. McGuire, B. C. Sales, and D. Mandrus, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 013711 (2009).
7. F. L. Ning, K. Ahilan, T. Imai, A. S. Sefat, M. A. McGuire, B. C. Sales, D. Mandrus, P. Cheng, B. Shen, and H.-H. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 037001 (2010).
8. Yu. A. Aleshchenko, A. V. Muratov, G. A. Umharino, S. Richter, A. A. Thomas, and R. Hühne, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 045601 (2021).
9. M. Abdel-Hafiez, Y. Zhang, Z. He, J. Zhao, C. Bergmann, C. Krellner, C.-Ga. Duan, X. Lu, H. Luo, P. Dai, and X.-J. Chen, *Phys. Rev. B* **91**, 024510 (2015).
10. B. Zeng, B. Shen, H. Luo, G. Mu, P. Cheng, H. Yang, L. Shan, C. Ren, and H.-H. Wen, *Phys. Rev. B* **85**, 224514 (2012).
11. K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, E. P. Khlybov, A. Zaleski, V. M. Pudalov, and Yu. F. Eltsev, *Supercond. Sci. Technol.* **26**, 015008 (2013).
12. Yu. F. Elstsev, K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, S. Yu. Gavrilkin, E. P. Khlybov, and V. M. Pudalov, *Phys.-Uspekhi* **57**, 827 (2014).
13. V. A. Vlasenko, O. A. Sobolevskiy, A. V. Sadakov, K. S. Pervakov, S. Yu. Gavrilkin, A. V. Dik, and Yu. F. Eltsev, *JETP Lett.* **107**, 119 (2018).
14. J. Moreland and J. W. Ekin, *J. Appl. Phys.* **58**, 3888 (1985).
15. S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, *Low Temp. Phys.* **42**, 1008 (2016).
16. Z. Popović, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, *J. Appl. Phys.* **128**, 013901 (2020).

17. M. Octavio, M. Tinkham, G.E. Blonder, and T.M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **27**, 6739 (1983).
18. R. Kümmel, U. Günsenheimer, and R. Nicolsky, *Phys. Rev. B* **42**, 3992 (1990).
19. G.B. Arnold, *J. Low Temp. Phys.* **68**, 1 (1987).
20. D. Averin and A. Bardas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1831 (1995).
21. U. Günsenheimer and A.D. Zaikin, *Phys. Rev. B* **50**, 6317 (1994).
22. T.P. Devereaux and P. Fulde, *Phys. Rev. B* **47**, 14638 (1993).
23. A.V. Sadakov, A.V. Muratov, S.A. Kuzmichev, O.A. Sobolevskiy, B.I. Massalimov, A.R. Prischepa, V.M. Mikhailov, K.S. Pervakov, V.A. Vlasenko, and T.E. Kuzmicheva, *JETP Lett.* **116**, 708 (2022).
24. A. Yamamoto, J. Jaroszynski, C. Tarantini, L. Balicas, J. Jiang, A. Gurevich, D.C. Larbalestier, R. Jin, A.S. Sefat, M.A. McGuire, B.C. Sales, D.K. Christen, and D. Mandrus, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 062511 (2009).
25. T.E. Kuzmicheva, S.A. Kuzmichev, K.S. Pervakov, and V.A. Vlasenko, *JETP Lett.* **112**, 786 (2020).
26. T.E. Kuzmicheva, S.A. Kuzmichev, K.S. Pervakov, and V.A. Vlasenko, *Phys. Rev. B* **104**, 174512 (2021).
27. S.A. Kuzmichev, K.S. Pervakov, V.A. Vlasenko, A.Yu. Degtyarenko, S.Yu. Gavrilkin, and T.E. Kuzmicheva, *JETP Lett.* **116**, 723 (2021).

Магнитная спираль в многослойной ферромагнитной наночастице и ее вращение электрическим током

А. А. Фраерман¹⁾

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2023 г.

После переработки 7 сентября 2023 г.

Принята к публикации 7 сентября 2023 г.

Теоретически исследована динамика намагниченности, индуцированная электрическим током протекающим в многослойной наночастице. Аналитически найден диапазон параметров, в котором происходит когерентное вращение магнитной спирали, формирующейся в этой системе из-за магнитостатического взаимодействия ферромагнитных слоев. Сделанные оценки свидетельствуют о возможности экспериментального наблюдения предсказанной моды нелинейных колебаний намагниченности.

DOI: 10.31857/S1234567823190102, EDN: xrqqrqx

Физический механизм, лежащий в основе воздействия спин-поляризованного электрического тока на распределение намагниченности, заключается в неколлинеарности векторов собственного магнитного момента носителей тока и намагниченности [1–3]. Связанный с этой “неадиабатичностью” спиновое состояние электронов вращающий момент принципиально изменяет динамику намагниченности, что используется для управления состоянием магнитных ячеек памяти и создания миниатюрных генераторов высокочастотного излучения. Такие генераторы, получившие название магнитных наноосцилляторов, наряду с достоинствами, имеют ряд недостатков, к которым относятся высокие пороговые токи начала генерации и малая мощность излучения [4, 5]. Для решения этих проблем рассматриваются новые конструкции наноосцилляторов и, в частности, изучается возможность когерентного вращения спиральных распределений намагниченности при протекании тока [6–10]. Известно, что магнитные спирали реализуются либо в системах без центра инверсии, в которых достаточно сильным является антисимметричный обмен Дзялошинского–Мории, либо в системах с дальнедействующим взаимодействием магнитных моментов, которое приводит к фрустрациям. Типичными представителями первого класса являются кристаллы MnSi, FeGe и др. [11, 12]. Ко второму классу относятся кристаллы некоторых редкоземельных элементов, таких, например, как гольмий и диспрозий [13]. Создание пленок со спиральным распределением намагниченности при комнатной температуре является сложной, а зачастую и

невыполнимой технологической задачей. В работах [14–16] предложен и реализован способ создания искусственных спиральных распределений намагниченности в латерально-ограниченных многослойных структурах, состоящих из ферромагнитных слоев, разделенных немагнитными прослойками. В настоящей работе будут сформулированы условия, при которых протекание электрического тока в этой системе приводит к когерентному вращению спиральной намагниченности.

Рассмотрим три одинаковых ферромагнитных нанодиска, расположенных один над другим, как показано на рис. 1. Радиус и толщина отдельного диска подобраны таким образом, чтобы он был однодоменным. Взаимодействие дисков имеет магнитостатическую природу. Если толщина диска много меньше его радиуса, то магнитный момент ориентирован в плоскости диска. Энергия трех дисков при этом записывается в виде

$$E = J_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + J_1 \cos(\varphi_3 - \varphi_2) + J_2 \cos(\varphi_3 - \varphi_1) - K \sum_{i=1}^3 \cos^2(\varphi_i), \quad (1)$$

где φ_i – азимутальный угол, определяющий ориентацию намагниченности i -ого диска, $J_1 > 0$ – константа магнитостатического взаимодействия ближайших дисков, $J_2 > 0$ – константа магнитостатического взаимодействия первого и третьего дисков, $K > 0$ – константа анизотропии, обусловленная, например, эллиптичностью дисков. Если анизотропия равна нулю, то наряду с антиферромагнитным распределением магнитных моментов есть решение, соответствующее

¹⁾e-mail: andr@ipmras.ru

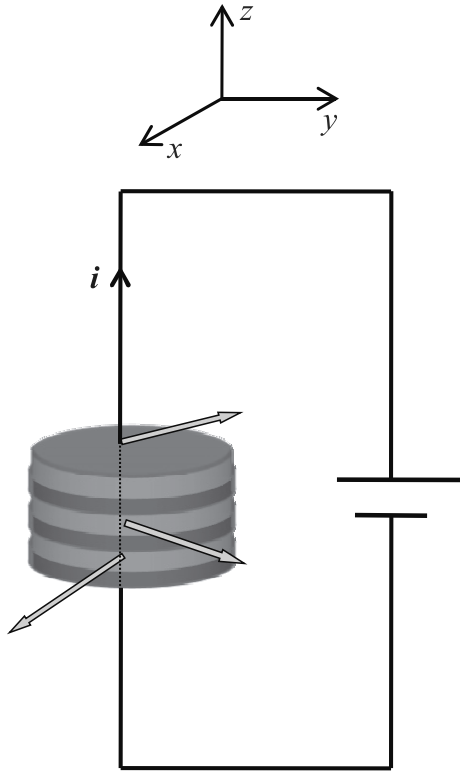


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема включения многослойной наночастицы в электрическую цепь. Стрелки указывают направление намагниченности ферромагнитных слоев

ющее неколлинеарному распределению $\varphi_1 = \pi - \varphi + \varphi_2, \varphi_2, \varphi_3 = \pi + \varphi + \varphi_2$, где

$$\cos \varphi = \frac{J_1}{2J_2}. \quad (2)$$

При выполнении неравенства $J_1 < 2J_2$ основным состоянием системы является магнитная спираль. Отметим, что это условие не может быть выполнено в случае дипольного магнитостатического взаимодействия. Для его реализации необходимо учесть высшие мультипольные моменты, которые не малы при условии, что расстояние между дисками много меньше их радиуса [14]. Условию (2) удовлетворяют решения с положительными и отрицательными углами φ , которые соответствуют различной киральности магнитной спирали. Учет анизотропии снимает вырождение по углу φ_2 (за исключением случая “симметричной” спирали $J_1 = J_2, \varphi = \pi/3$) и изменяет условие существования неколлинеарного состояния $J_1 < 2(J_2 - K)$.

Динамика намагниченности определяется уравнением Ландау–Лифшица–Гильберта, дополненного слагаемыми, описывающими воздействие на намагниченность спин-поляризованного тока [3]. С учетом

постоянства модуля намагниченности, эти уравнения представляют собой систему уравнений первого порядка для полярных и азимутальных углов, определяющих направление магнитного момента в каждом из дисков. В работах [17–19] было показано, что ситуация упрощается при наличии сильной анизотропии “легкая плоскость”, которая реализуется в рассматриваемом случае. Линеаризуя уравнения динамики относительно малого отклонения полярного угла $\delta = \frac{\pi}{2} - \theta \ll 1$, можно получить замкнутое уравнение для азимутального угла, представляющее собой уравнение физического маятника с затуханием. При этом $\delta \approx \dot{\varphi}/\Omega$, где $\dot{\varphi}$ – скорость изменения азимутального угла, $\Omega = \gamma K_{\perp}/M$ – частота, соответствующая полю анизотропии “легкая плоскость”, γ – гиромагнитное отношение, $K_{\perp}$ – константа анизотропии “легкая плоскость” ($K_{\perp} \approx 2\pi M^2$, $\Omega \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$), M – модуль магнитного момента. Более того, так как “масса” эффективного осциллятора мала ($\sim 1/\Omega$), можно пренебречь членом со второй производной и перейти к пределу “передемпфированного” осциллятора, у которого в отсутствие тока время затухания меньше периода колебаний [19]. В этом приближении система уравнений Ландау–Лифшица сводится к трем уравнениям первого порядка для азимутальных углов φ_i . Обобщая результаты [17–19] на случай трех осцилляторов, получаем систему

$$\alpha \dot{\varphi} = -\frac{\gamma}{M} \frac{\partial E}{\partial \varphi_i} - j(\mathbf{e}_z \cdot [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_{i+1} - \mathbf{m}_{i-1}]]), \quad (3)$$

где E – энергия (1), α – безразмерная константа затухания, $\mathbf{e}_z$ – единичный вектор в направлении нормали к дискам, $\mathbf{m}_i = (\cos \varphi_i, \sin \varphi_i, 0)$ – единичный вектор в направлении магнитного момента i -го диска. Предполагается, что все слагаемые, содержащие индексы меньше единицы и больше трех, равны нулю. Частота $j = \zeta \frac{e i \gamma \hbar}{2e M d}$, i – плотность тока, ε – коэффициент его спиновой поляризации, e – заряд электрона, d – толщина диска, ζ – коэффициент, определяющий величину эффекта и не превышающий, согласно имеющимся расчетам, нескольких процентов [1–3]. Отметим, что второе слагаемое в (3) получило в литературе название “неадиабатического” и меньше в ζ раз другого, “адиабатического” вклада в индуцируемый электрическим током вращательный момент. Однако “адиабатический” вклад в нашем случае $\sim 1/\Omega$ и, согласно развиваемой модели, не учитывается. Мы покажем, что несмотря на малость слагаемого $\sim j$, его влияние на динамику намагниченности рассматриваемой системы существенно. Запишем уравнения (3) в явном виде

$$\begin{cases} \alpha\dot{\varphi}_1 = (j - v_1) \sin(\varphi_2 - \varphi_1) - \\ - v_2 \sin(\varphi_3 - \varphi_1) + v_K \sin(2\varphi_1), \\ \dot{\alpha}\varphi_2 = (j - v_1) \sin(\varphi_3 - \varphi_2) + \\ + (j + v_1) \sin(\varphi_2 - \varphi_1) + v_K \sin(2\varphi_2), \\ \alpha\dot{\varphi}_3 = (j + v_1) \sin(\varphi_3 - \varphi_2) + \\ + v_2 \sin(\varphi_3 - \varphi_1) + v_K \sin(2\varphi_3), \end{cases} \quad (4)$$

$v_{1,2} = \gamma J_{1,2}/M$, $v_K = \gamma K/M$. Найдём величину тока, при котором стационарное состояние системы (4) теряет устойчивость и начинается вращение спирали. В отсутствие тока и анизотропии стационарное состояние определяется выражением (2), в котором для определенности положим $\varphi_2 = 0$. Будем искать малые поправки к этому решению в виде $\psi_i = \psi_i(0) \exp(\lambda t)$. Ограничиваясь линейными слагаемыми по v_K и квадратичными по j , находим уравнение для инкремента λ

$$\begin{aligned} \alpha\lambda(\alpha\lambda + 2v_2 \sin^2 \varphi) \left(\alpha\lambda + \frac{3}{2}v_1 \cos \varphi \right) = \\ = 4j^2 v_2 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi - 4v_1^2 v_K \sin^2 \varphi \left(\left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 - 1 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Если $j, v_K = 0$, то существует решение $\lambda = 0$, соответствующее когерентному вращению спирали. При наличии анизотропии такое вращение затруднено и требуется протекание тока для выхода из стационарного состояния. Как следует из (5), критическое значение тока определяется выражением

$$j_1^2 = 4v_2 v_K \left(\left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 - 1 \right). \quad (6)$$

Отметим, что сомножитель $\left(\left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 - 1 \right)$ понижает критический ток начала вращения спирали, что связано с эффективным уменьшением одноосной анизотропии для неколлинеарного распределения намагниченности в дисках. Для симметричной спирали ($v_1 = v_2$, $\varphi = \pi/3$) эта эффективная анизотропия, а вместе с ней и j_1 , равны нулю. При $j > j_1$ стационарное состояние неустойчиво и развитие этой неустойчивости приводит к когерентному вращению спирали.

Для определения параметров этого вращения пренебрежем анизотропией и будем искать решение системы (4) в виде $\varphi_i = \omega t + \psi_i$, где фазы ψ_i не зависят от времени. Система (4) превращается в систему трех трансцендентных уравнений для определения

частоты ω и разности фаз $\xi_1 = \psi_1 - \psi_2$, $\xi_3 = \psi_3 - \psi_2$. Решение этих уравнений имеет вид

$$3\alpha\omega = 2j(\sin \xi_3 - \sin \xi_1), \quad (7)$$

$$\sin \xi_3 = \chi \sin \xi_1, \quad \chi = \frac{j + 3v_1}{j - 3v_1}, \quad (8)$$

$$\cos \xi_1 = \frac{\chi^2 - 1 + \kappa^2}{2\kappa\chi},$$

$$\kappa = \frac{v_1 - j\chi - (v_1\chi + j)}{2v_2} = \frac{j^2 + 3v_1^2}{v_2(3v_1 - j)}. \quad (9)$$

Из условия $\cos \xi_1 \geq -1$ получаем, что ток не должен превышать критическое значение j_2

$$j^2 \leq j_2^2 = 6v_1 v_2 \left(1 - \frac{v_1}{2v_2} \right). \quad (10)$$

При токах, близких к критическому, зависимость частоты вращения от j приобретает вид

$$\omega \approx -\beta \frac{v_1}{\alpha} \sqrt{\frac{j_2 - j}{j_2}}, \quad \beta = 8 \left(\frac{2v_2 - v_1}{2v_1 - v_2} \right)^{0.5}. \quad (11)$$

При своем вращении спираль искажается, а при $j = j_2$ переходит в коллинеарное антиферромагнитное состояние и останавливается. Такое поведение связано с неодинаковыми условиями, в которых находятся ферромагнитные диски. Так центральный диск имеет только ближайших соседей и испытывает вращающий момент, обусловленный первым и третьим дисками. Рассмотренная задача является частным случаем задачи о синхронном колебании связанных нелинейных осцилляторов, собственные частоты которых различны. Синхронное колебание в такой системе возможно, если разность собственных частот не превышает некоторой критической величины, зависящей от взаимодействия осцилляторов [20]. В нашем случае увеличение j приводит к увеличению разности собственных частот, деформации спирали и, в конечном счете, прекращению вращения. Суммируя результаты, мы видим, что вращение спирали происходит в диапазоне токов, определяемом неравенствами $|j_1| < |j| < |j_2|$, что возможно при выполнении следующего соотношения для параметров системы:

$$\frac{2v_K}{3v_1} < \frac{1 - \frac{v_1}{2v_2}}{\left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 - 1}. \quad (12)$$

При малых j из (7)–(9) имеем

$$\omega = \mp \frac{4j}{3\alpha} \sqrt{1 - \left(\frac{v_1}{2v_2} \right)^2}. \quad (13)$$

Верхний и нижний знаки в этой формуле соответствуют спиралям с киральностью “по” и “против часовой стрелки”, соответственно. Направление вращения спирали (знак ω) определяется произведением знаков киральности и электрического тока. Отметим, что этот результат, с точностью до обозначений, совпадает с результатом для вращения спирали в кристаллах без центра симметрии [6–8]. Функция $\omega(j)$ имеет экстремум, который определяет максимальное значение частоты вращения спирали. Из (7)–(9) следует, что сопротивление рассматриваемой системы является функцией j и, следовательно, плотности тока i . Действительно, многослойная частица представляет собой последовательное соединение двух спин-вентильных контактов, сопротивление каждого из которых определяется косинусом угла между намагниченностями дисков. Поэтому, сопротивление частицы может быть записано в виде

$$R = R_a + R_p - \frac{1}{2}(R_a - R_p)(\cos \xi_1 + \cos \xi_3), \quad (14)$$

где $R_{p,a}$ – сопротивление каждого из контактов при параллельной (антипараллельной) ориентации магнитных моментов. С увеличением плотности тока это сопротивление монотонно увеличивается, достигая своего максимального значения $2R_a$ при $j = j_2$.

Согласно расчетам [14], для ферромагнитных дисков из кобальта диаметром 300 нм, толщиной 5 нм, разделенных немагнитной прослойкой ~ 5 нм, $v_1 \approx 3 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$, $v_2 \approx 2 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ ($\gamma \approx 10^7 \text{ Oe}^{-1} \text{ c}^{-1}$). Если принять, что $v_K \approx 2 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$, то $j_1 \approx 10^9 \text{ c}^{-1}$, а $j_2 \approx 3 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$. Стартовый ток, соответствующий началу вращения спирали, $i_1 > 5 \cdot 10^7 \text{ A/cm}^2$ ($\zeta \sim 0.04$, $\varepsilon \sim 0.5$, $M \sim 10^3 \text{ Gs}$, $d \sim 5 \text{ nm}$), а частота вращения при таком токе, согласно формуле (13), $\omega \sim 10^{10} \text{ c}^{-1}$ ($\alpha \sim 0.1$). Для прямого экспериментального наблюдения вращения спирали нужно измерять высокочастотные колебания электросопротивления. Для такого эксперимента следует заменить один из электродов на ферромагнитный с фиксированной намагниченностью. Тогда изменение взаимной ориентации намагниченностей фиксированного электрода и первого ферромагнитного диска приведет к изменению сопротивления всей системы и даст информацию о динамике намагниченности и возможности наблюдения генерации электромагнитного излучения. Однако, крутящий момент, обусловленный фиксированным ферромагнитным электродом, изменит динамику намагниченности системы, что должно быть принято во внимание при более точных расчетах. Итак, в рамках сделанных предположений, аналитически найден диапазон токов, в котором происходит

когерентное вращение магнитной спирали, формирующейся в системе взаимодействующих ферромагнитных нанодисков. Такая мода нелинейных колебаний намагниченности может быть названа “мельницей Слончевского”, которая была предсказана для двух ферромагнитных частиц в работе [21] и наблюдалась ранее экспериментально лишь для магнитных вихрей [22]. В силу большой амплитуды изменения намагниченности и возможности варьирования параметров, рассмотренная система может представлять интерес для создания высокочастотных наногенераторов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант # 21-12-00271.

1. D. C. Ralph and M. D. Stiles, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 1190 (2008).
2. J. Xiao, A. Zangwill, and M. D. Stiles, Phys. Rev. B **73**, 054428 (2006).
3. S. Zhang and Z. Li, Phys. Rev. Lett. **93**, 127204 (2004).
4. A. Slavin and V. Tiberkevich, IEEE Trans. Magn. **45**, 1875 (2009).
5. K. A. Zvezdin and E. G. Ekomasov, Phys. Met. Metallogr. **123**, 201 (2022).
6. K. Goto, H. Katsura, and N. Nagaosa, arXiv:0807.2901v1 [cond-mat.str-el] (2008).
7. S. K. Kudtarkar, Phys. Lett. A **374**, 366 (2009),
8. V. V. Ustinov and I. A. Yasyulevich, Phys. Rev. B **106**, 064417 (2022).
9. J. Masell, X. Yu, N. Kanazawa, Y. Tokura, and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **102**, 180402(R) (2020).
10. O. Wessely, B. Skubic, and L. Nordström, Phys. Rev. B **79**, 104433 (2009).
11. S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Boni, Science **323**, 915 (2009).
12. N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, Science **341**, 636 (2013).
13. S. J. Jensen and A. R. Mackintosh, *Rare Earth Magnetism: Structures and Excitations*, Oxford University Press, Oxford (1991).
14. A. A. Fraerman, B. A. Gribkov, S. A. Gusev, A. Yu. Klimov, V. L. Mironov, D. S. Nikitushkin, V. V. Rogov, S. N. Vdovichev, B. Hjorvarsson, and H. Zabel, J. Appl. Phys. **103**, 073916 (2008).
15. С. Н. Вдовичев, Б. А. Грибков, А. Ю. Климов, В. Л. Миронов, И. М. Нефедов, В. В. Рогов, А. А. Фраерман, И. А. Шерешевский, С. А. Гусев, Письма в ЖЭТФ **94**, 418 (2011).

16. К. Р. Мухаматчин, А. А. Фраерман, Письма в ЖЭТФ **93**, 809 (2011).
17. Ya. B. Bazaliy, Phys. Rev. B **76**, 140402R (2007).
18. Ya. B. Bazaliy, Appl. Phys. Lett. **91**, 262510 (2007).
19. Ya. B. Bazaliy, D. Olaosebikan, and B. A. Jones, arXiv:0705.0406v1 [cond-mat.mtrl-sci] (2007).
20. А. Пиковский, М. Розенблюм, Ю. Куртс, *Синхронизация. Фундаментальное нелинейное явление*, Техносфера, М. (2003).
21. J. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
22. V. Sluka, A. Kakay, A. M. Deac, D. E. Burgler, R. Hertel, and C. M. Schneider, Phys. Rev. B **86**, 214422 (2012).

Диффузионные моды двухзонных фермионов в условиях диссипативной динамики, сохраняющей число частиц

А. А. Люблинская⁺*, И. С. Бурмистров^{+×1)}

⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 142432 Черноголовка, Россия

*Московский физико-технический институт, 141700 Москва, Россия

[×]Лаборатория физики конденсированного состояния, Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 августа 2023 г.

После переработки 27 августа 2023 г.

Принята к публикации 28 августа 2023 г.

Управляемые диссипативные системы интересны возможностью создания контролируемых нетривиальных квантово-коррелированных многочастичных состояний. Особняком стоят диссипативные модели, сохраняющие число частиц. Как известно, в квантовых системах с унитарной динамикой сохранение числа частиц и случайное рассеяние приводят к диффузионному поведению двухчастичных возбуждений (диффузонов и куперонов). Существование диффузионных мод в сохраняющей число частиц диссипативной динамике еще недостаточно изучено. В данной работе мы явно демонстрируем существование диффузонов в двухзонной модели с диссипативной динамикой, направленной на заполнение одной фермионной зоны за счет опустошения другой. Исследуемая модель является обобщением модели, предложенной в F. Tonielli, J. C. Budich, A. Altland, and S. Diehl, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 240404 (2020). В работе получена зависимость коэффициента диффузии от параметров модели и скорости диссипации. Существование диффузионных мод усложняет проектирование макроскопических многочастичных коррелированных состояний.

DOI: 10.31857/S1234567823190114, EDN: xrxesz

В последнее время диссипативная динамика открытых многочастичных квантовых систем вызывает большой интерес [1–5], поскольку позволяет изучать неравновесные состояния материи как теоретически [6–10], так и экспериментально [11]. Эта область исследований богата нетривиальными и неинтуитивными результатами, включая, например, неравновесные фазовые переходы [12–18]. Управляемые диссипативные системы позволяют контролируемым образом создавать квантовые многочастичные коррелированные стационарные состояния, не имеющие аналога в гамильтоновой динамике [19–44].

Одним из наиболее распространенных аналитических методов для описания моделей с внешним источником диссипации является уравнение Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) [45, 46]. В этом уравнении динамика матрицы плотности явно разделена на унитарную и диссипативную части, определяемые гамильтонианом и прыжковыми операторами соответственно. В недавних теоретических работах была разрабо-

тана процедура перехода от уравнения ГКСЛ к описанию систем в рамках квантовой теории поля на келдышевском временном контуре (см. обзоры [1, 5]).

Как известно, симметрии и законы сохранения являются основополагающими принципами в квантовой теории поля. В гамильтоновых системах сохранение числа частиц в сочетании со случайным рассеянием приводит к диффузионной динамике. Также диффузия может появиться из-за сбоя квантовой когерентности, вызванной взаимодействием с внешней средой в виде тепловой бани [47–50]. Возникает вопрос: приведет ли сохранение числа частиц к диффузии в диссипативных моделях? Общий ответ на него до сих пор не установлен. Одно из препятствий в ответе на него заключается в том, что управляемые диссипативные системы конструируются таким образом, чтобы избежать случайности в уравнении ГКСЛ.

В этой работе мы рассматриваем общий вопрос о существовании диффузионных режимов в описываемых уравнением ГКСЛ системах с диссипативной динамикой, сохраняющей число частиц. Существо-

¹⁾e-mail: burmi@itp.ac.ru

ют ли диффузионные двухчастичные возбуждения (диффузоны и купероны), широко изученные для неупорядоченных гамильтонианов, в таких моделях? В работе мы показываем, что в широком классе диссипативных систем с сохраняющимся числом частиц диффузия возникает естественным образом, как это происходит при унитарной эволюции.

Мы рассматриваем обобщение модели, изучаемой в работах [35, 51]. Модель описывает двухзонные фермионы, которые рассеиваются случайными динамическими бозонными полями, выступающими в роли квантового шума. В отличие от работ [35, 51], рассматриваемая обобщенная модель допускает нелокальное рассеяние. Усреднение по квантовому шуму приводит к диссипативной динамике системы, описываемой в рамках уравнения ГКСЛ с прыжковыми операторами, переводящими фермионы из верхней зоны спектра в нижнюю (и наоборот) со скоростью, определяемой рассеянием на бозонных полях. Вычисление суммы диаграмм лестничного типа (диффузона) с линиями взаимодействия, индуцированными диссипацией, приводит к выражению (21) с диффузионным полюсом канонического вида. Соответствующий коэффициент диффузии (22) зависит от параметров модели.

Модель. Рассмотрим следующую статистическую сумму на келдышевском контуре:

$$Z[\bar{\Phi}, \Phi] = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}_{\pm}, \psi_{\pm}] e^{iS_0 + iS_{\Phi}}. \quad (1)$$

Она зависит от вспомогательных бозонных полей Φ и $\bar{\Phi}$. Здесь $\psi_{\pm} = \{\psi_{1,\pm}, \psi_{2,\pm}\}$ и $\bar{\psi}_{\pm} = \{\bar{\psi}_{1,\pm}, \bar{\psi}_{2,\pm}\}$ обозначают фермионные поля со спином $s = 1/2$, соответствующие операторам уничтожения и рождения на прямой (“+”) и обратной (“−”) ветвях контура. Кинетическая часть действия описывает газ свободных электронов,

$$S_0 = \int \sum_{\mathbf{q}, t} \tau \bar{\psi}_{\mathbf{q}, \tau}(t) (i\partial_t - H_0(\mathbf{q})) \psi_{\mathbf{q}, \tau}(t), \quad (2)$$

где $\mathbf{q}$ – это d -мерный импульс, и используется сокращенное обозначение $\int_{\mathbf{q}, t} \equiv \int dt \int d^d \mathbf{q} / (2\pi)^d$. Гамильтониан $H_0(\mathbf{q})$ представляет собой матрицу 2×2 и действует в спиновом пространстве. Предположим, что $H_0(\mathbf{q})$ может быть диагонализирован унитарной матрицей $U_{\mathbf{q}}$ (также 2×2), такой что $H_0(\mathbf{q}) = \xi_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \sigma_z U_{\mathbf{q}}^{\dagger}$. Здесь $\sigma_z = \text{diag}\{1, -1\}$ обозначает матрицу Паули. Удобно ввести второй набор фермионных полей $c_{\mathbf{q}} = \{c_{\mathbf{q}, u}, c_{\mathbf{q}, d}\} = U_{\mathbf{q}}^{\dagger} \psi_{\mathbf{q}}$ и $\bar{c}_{\mathbf{q}} = \{\bar{c}_{\mathbf{q}, u}, \bar{c}_{\mathbf{q}, d}\} = \bar{\psi}_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}$. Эти фермионные поля соответствуют уничтожению

и рождению фермионов в верхней (с энергией $+\xi_{\mathbf{q}}$) и нижней (с энергией $-\xi_{\mathbf{q}}$) зонах, т.е.

$$S_0 = \int \sum_{\mathbf{q}, t} \tau \bar{c}_{\mathbf{q}, \tau}(t) (i\partial_t - \xi_{\mathbf{q}} \sigma_z) c_{\mathbf{q}, \tau}(t). \quad (3)$$

Свободные фермионы рассеиваются случайными динамическими полями Φ и $\bar{\Phi}$, которые описываются локальным по координате и времени действием

$$S_{\Phi} = \int \sum_{\mathbf{x}, t} \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\mathbf{a}=u,d} \sum_{\tau=\pm} \tau \left\{ \bar{l}_{\mathbf{a}, \tau}(\mathbf{x}, t - \delta' \tau) \bar{\Phi}_{\mathbf{a}, \alpha, \tau}(\mathbf{x}, t) \times \psi_{\alpha, \tau}(\mathbf{x}, t - \delta' \tau - \epsilon'_{\mathbf{a}} \tau) + \bar{\psi}_{\alpha, \tau}(\mathbf{x}, t - \delta' \tau) \Phi_{\mathbf{a}, \alpha, \tau}(\mathbf{x}, t) \times l_{\mathbf{a}, \tau}(\mathbf{x}, t - \delta' \tau - \epsilon'_{\mathbf{a}} \tau) \right\}. \quad (4)$$

Здесь используется обозначение: $\int_{\mathbf{x}, t} \equiv \int dt \int d\mathbf{x}$. Также мы ввели еще один набор фермионных полей $\bar{l}_{\mathbf{q}, \mathbf{a}} = v_{\mathbf{q}}^* \bar{c}_{\mathbf{q}, \mathbf{a}}$ и $l_{\mathbf{q}, \mathbf{a}} = v_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}, \mathbf{a}}$ с вспомогательными функциями импульса $v_{\mathbf{q}}$. Рассеяние фермионов на бозонных полях, описываемое уравнением (4), является необычным, поскольку в ходе этого рассеяния фермионы переходят из одного базиса в другой. В силу соотношения $l_{\mathbf{q}} = v_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}^{\dagger} \psi_{\mathbf{q}}$, рассеяние становится эффективно нелокальным в пространстве, однако для заданной матрицы $U_{\mathbf{q}}$ это можно исправить правильным выбором $v_{\mathbf{q}}$. Хотя в работах [35, 51] рассматривалась именно такая ситуация, как мы покажем ниже, это не является необходимым для появления диффузии. Подчеркнем, что рассеяние в уравнении (4) сохраняет общее число частиц.

Случайные динамические бозонные поля Φ и $\bar{\Phi}$ в уравнении (4) предполагаются гауссовыми, некоррелированными в пространстве и времени и с нулевым средним значением. Среди парных корреляционных функций ненулевыми являются только такие:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathbf{a}, \alpha, \pm}(\mathbf{x}, t) \bar{\Phi}_{\mathbf{a}, \alpha, \pm}(\mathbf{x}', t') \rangle &= \gamma_{\alpha}^{(a)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t' \pm \delta_{\mathbf{a}}), \\ \langle \Phi_{\mathbf{a}, \alpha, \tau_{\mathbf{a}}}(\mathbf{x}, t) \bar{\Phi}_{\mathbf{a}, \alpha, -\tau_{\mathbf{a}}}(\mathbf{x}', t') \rangle &= \gamma_{\alpha}^{(a)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\delta(t - t' + \delta_{\mathbf{a}}) + \delta(t - t' - \delta_{\mathbf{a}})], \end{aligned} \quad (5)$$

где $\tau_{u/d} = \pm 1$, а $\gamma_{\alpha}^{(a)}$ есть скорость рассеяния между фермионом в состоянии с проекцией спина $\alpha = 1, 2$ и фермионом в зоне $\mathbf{a} = u, d$. В уравнениях (4) и (5) мы ввели ряд одновременных регуляторов, $\epsilon'_{\mathbf{u}} = -\epsilon'_{\mathbf{d}} = -\epsilon' > 0$ и $\delta_{\mathbf{u}} = -\delta_{\mathbf{d}} = \delta'' > 0$, удовлетворяющих неравенству $\delta' > \delta'' > \epsilon' > 0$. В конце вычислений они все должны быть приравнены к нулю.

Стоит отметить, что после келдышевского поворота [52] парная корреляционная функция бозонов

приобретает стандартную матричную структуру в келдышевском пространстве:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\mathbf{k},\mathbf{a},\alpha}(\omega) &= -i\langle \Phi_{\mathbf{a},\alpha,\text{cl}/\mathbf{q}}(\mathbf{x},t) \bar{\Phi}_{\mathbf{a},\alpha,\text{cl}/\mathbf{q}}(\mathbf{x}',t') \rangle_{\mathbf{k},\omega} \\ &= i\gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})} s_{\mathbf{a}} \begin{pmatrix} -2s_{\mathbf{a}} & 1_{\omega}^R \\ -1_{\omega}^A & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $s_{\mathbf{u}} = -s_{\mathbf{d}} = 1$. Индекс R/A обозначает, что $1_{\omega}^{R/A}$ соответствует $\delta(t \mp 0^+)$ после преобразования Фурье во временное представление. Кроме того, уравнение (6) указывает, что случайные бозонные поля имеют функцию распределения, равную $-s_{\mathbf{a}}$. Следовательно, бозонные поля (в интересующем нас диапазоне частот) соответствуют равновесной тепловой бане при $T = 0$.

Келдышевское действие в терминах s -фермионов. Статистическая сумма (1) представляет собой случайную величину с некоторой функцией распределения, вычисление которой является интересной задачей. В данной работе мы ограничимся изучением только ее среднего,

$$\langle Z[\Phi, \bar{\Phi}] \rangle_{\Phi} = \int \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] e^{iS_0 + iS_L}, \quad S_L = \frac{i}{2} \langle S_{\Phi}^2 \rangle_{\Phi}. \quad (7)$$

Действие S_L можно явно записать в базисе s -фермионов как

$$\begin{aligned} S_L &= -i(2\pi)^d \int_{\mathbf{p}_j, t} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \sum_{\mathbf{a}=\mathbf{u},\mathbf{d}} \sum_{\alpha=1,2} \gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})} \sum_{\tau=\pm} \\ &\times \left[\bar{c}_{\mathbf{p}_1,-}(t) \bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2}^{(\mathbf{a},\alpha)} c_{\mathbf{p}_2,-}(t_a^+) \bar{c}_{\mathbf{p}_3,+}(t-\delta) \mathcal{L}_{\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4}^{(\mathbf{a},\alpha)} c_{\mathbf{p}_4,+}(t_a^- - \delta) \right. \\ &\left. - \bar{c}_{\mathbf{p}_1,\tau}(t_a^{\tau}) \bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2}^{(\mathbf{a},\alpha)} c_{\mathbf{p}_2,\tau}(t) \bar{c}_{\mathbf{p}_3,\tau}(t-\delta_{\tau}) \mathcal{L}_{\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4}^{(\mathbf{a},\alpha)} c_{\mathbf{p}_4,\tau}(t_a^{\tau} - \delta_{\tau}) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь также введены одновременные регуляторы $t_a^{\pm} = t \pm \epsilon_a$ и $\delta_{\tau} = \tau\delta$, такие что $\epsilon_{\mathbf{u}} = -\epsilon_{\mathbf{d}} = -\epsilon$ и $\delta > \epsilon > 0$. Четыре матрицы $\mathcal{L}^{(\mathbf{a},\alpha)}$ действуют в пространстве $\mathbf{u}/\mathbf{d}$ и определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}_{\mathbf{pq}}^{(\mathbf{u},\alpha)}]_{\mathbf{ab}} &= v_{\mathbf{q}} [U_{\mathbf{p}}^{\dagger}]_{\mathbf{a},\alpha} \delta_{\mathbf{b}\mathbf{u}}, \quad [\mathcal{L}_{\mathbf{pq}}^{(\mathbf{d},\alpha)}]_{\mathbf{ab}} = -v_{\mathbf{p}}^* [U_{\mathbf{q}}]_{\alpha,\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{a}\mathbf{d}}, \\ \bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{pq}}^{(\mathbf{a},\alpha)} &= [\mathcal{L}_{\mathbf{qp}}^{(\mathbf{a},\alpha)}]^{\dagger}. \end{aligned} \quad (9)$$

Действие $S_0 + S_L$ инвариантно относительно глобальных $U(1) \times U(1)$ преобразований, $\bar{c}_{\pm} \rightarrow e^{-i\chi_{\pm}} \bar{c}_{\pm}$ и $c_{\pm} \rightarrow e^{i\chi_{\pm}} c_{\pm}$ с $\chi_{+} \neq \chi_{-}$. Эта сильная симметрия означает сохранение общего числа частиц в модели. Подчеркнем, что не существует ни сильной, ни слабой $U(1)$ -симметрии действия, которая могла бы быть связана с сохранением $\mathbf{u}$ - или $\mathbf{d}$ -фермионов по отдельности. Трансляционная инвариантность является слабой симметрией модели [1, 53, 54], поскольку S_L инвариантно только относительно трансляций

$\bar{c}_{\mathbf{q},\pm} \rightarrow e^{-i\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}_{\pm}} \bar{c}_{\mathbf{q},\pm}$ и $c_{\mathbf{q},\pm} \rightarrow e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}_{\pm}} c_{\mathbf{q},\pm}$ с $\boldsymbol{\eta}_{+} = \boldsymbol{\eta}_{-}$, т.е. действующих одинаково на прямой и обратной ветвях контура Келдыша. Заметим, что если бы бозонные поля были реальным случайным потенциалом, то отсутствовала бы даже слабая симметрия для трансляционной инвариантности. Тем не менее отсутствие сильной симметрии для трансляционной инвариантности позволяет s -фермионам передавать не только энергию, но и релаксировать по импульсу при рассеянии на бозонных полях.

Уравнение ГКСЛ. Отметим, что усредненная статистическая сумма $\langle Z[\Phi, \bar{\Phi}] \rangle_{\Phi}$ соответствует матрице плотности ρ , динамика которой определяется уравнением ГКСЛ

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \int_{\mathbf{x}} \left(i[\rho, H_0] + \sum_{\mathbf{a}=\mathbf{u},\mathbf{d}} \sum_{\alpha=1,2} \gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})} (2L_{\mathbf{a},\alpha} \rho L_{\mathbf{a},\alpha}^{\dagger} \right. \\ &\quad \left. - \{L_{\mathbf{a},\alpha}^{\dagger} L_{\mathbf{a},\alpha}, \rho\}) \right), \end{aligned} \quad (10)$$

с прыжковыми операторами $L_{\mathbf{u},\alpha} = \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) l_{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ и $L_{\mathbf{d},\alpha} = \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) l_{\mathbf{d}}^{\dagger}(\mathbf{x})$. Таким образом, скорости рассеяния $\gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})}$, по сути, определяют скорость диссипации. В случае половинного заполнения уравнение ГКСЛ имеет стационарное решение – темновое состояние, $\rho = |D\rangle\langle D|$, в котором $\mathbf{d}$ -зона полностью занята, а $\mathbf{u}$ -зона пуста.

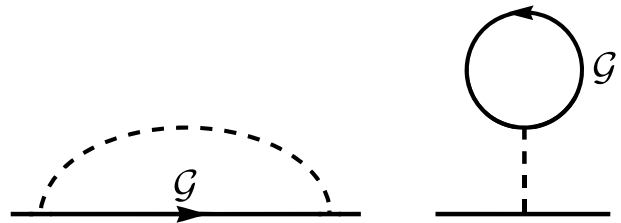


Рис. 1. Диаграммы типа Фока и Хартри для собственной энергии в самосогласованном борновском приближении. Сплошные линии обозначают самосогласованные функции Грина, а штрихованные показывают взаимодействие, индуцированное диссипацией (функции Грина бозона $\mathcal{D}_{\mathbf{p},\mathbf{a},\alpha}(\omega)$)

Самосогласованное борновское приближение. Темновое состояние можно получить из анализа келдышевского действия $S_0 + S_L$. Ему соответствует самосогласованное решение уравнения Дайсона, записанное для одночастичной функции Грина в низшем порядке по силе диссипации $\gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})}$ (см. рис. 1) [35].

Самосогласованные функции Грина диагональны в $\mathbf{u}/\mathbf{d}$ -пространстве и имеют вид (подробности см. в [51])

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{a}}^{R/A}(\varepsilon) = \left[\varepsilon - \xi_{\mathbf{q}} s_{\mathbf{a}} \pm i \bar{\gamma}_{\mathbf{a}} |v_{\mathbf{q}}|^2 \right]^{-1}, \quad (11)$$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{a}}^K(\varepsilon) = s_{\mathbf{a}} \left[\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{a}}^R(\varepsilon) - \mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{a}}^A(\varepsilon) \right],$$

где $\bar{\gamma}_{\mathbf{a}} = \int_p [U_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{\gamma}^{(\mathbf{a})} U_{\mathbf{p}}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}}$. Здесь введена двумерная матрица $\hat{\gamma}^{(\mathbf{a})} = \text{diag}\{\gamma_1^{(\mathbf{a})}, \gamma_2^{(\mathbf{a})}\}$. Заметим, что множитель $s_{\mathbf{a}} = \pm 1$ определяет функцию распределения (как $(1-s_{\mathbf{a}})/2$) c -фермионов в верхней и нижней зонах. Следовательно, уравнение (11) действительно описывает темновое состояние с полностью занятой d -зоной и полностью пустой u -зоной.

Лестничное суммирование для диффузона.

Как известно, диффузии частиц в неупорядоченных системах соответствует диффузон, представляющий собой частично-дырочное возбуждение, описываемое лестничными диаграммами примесного рассеяния [55]. Поскольку в рассматриваемой модели имеет место релаксация импульса, естественно ожидать, что лестничные диаграммы с диссипативными линиями (бозонная корреляционная функция (5)) могли бы приводить к диффузионному полюсу. Рассмотрим двухчастичное неприводимое среднее

$$\langle\langle c_{\mathbf{p}_+, \mathbf{a}, \nu}(t_1) \bar{c}_{\mathbf{p}_-, \mathbf{b}, \mu}(t_1) \cdot c_{\mathbf{q}_-, \mathbf{b}', \mu'}(t_2) \bar{c}_{\mathbf{q}_+, \mathbf{a}', \nu'}(t_2) \rangle\rangle, \quad (12)$$

где $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{q}/2$, $\mathbf{q} = \mathbf{q} \pm \mathbf{q}/2$, а $\nu, \nu', \mu, \mu' = 1, 2$ – индексы в пространстве Келдыша после поворота. Такое двухчастичное неприводимое среднее соответствует корреляционной функции плотность-плотность и в отсутствие диссипации, на уровне самосогласованного борновского приближения, дает произведение двух функций Грина, $\mathcal{G}_{\mathbf{p}_+, \mathbf{a}}^{\nu\nu'}(\varepsilon_+) \mathcal{G}_{\mathbf{p}_-, \mathbf{b}}^{\mu'\mu}(\varepsilon_-) \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q})$ (после преобразования Фурье из временного представления в частотное), где $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \Omega/2$. Заметим, что мы не рассматриваем лестницу для куперона, которая порождается корреляционной функцией вида (12), в которой $\bar{c}(t_1)$ заменено на $c(t_1)$, а $c(t_2)$ заменено на $\bar{c}(t_2)$. Из-за того, что диссипативное взаимодействие мгновенное в S_L куперонная лестница зануляется из-за причинности.

Чтобы рассматривать двухчастичную корреляционную функцию (12) за рамками самосогласованного борновского приближения, удобно сделать келдышевский поворот в действии S_L . Заметим, что для вычисления лестницы не нужно следить за одновременной регуляризацией. Тогда мы получаем

$$S_L = \frac{i}{2} \gamma (2\pi)^d \int \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \sum_{\mathbf{a}=\mathbf{u}, \mathbf{d}} \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\nu, \mu=0,1} \times P_{\mu\nu} \bar{c}_{\mathbf{p}_1}(t) \tau_{\mu} \bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}^{(\mathbf{a}, \alpha)}(t) \bar{c}_{\mathbf{p}_3}(t) \tau_{\nu} \mathcal{L}_{\mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4}^{(\mathbf{a}, \alpha)}(t) c_{\mathbf{p}_4}(t). \quad (13)$$

Здесь τ_0 и τ_1 есть единичная матрица и стандартная матрица Паули τ_x , соответственно. Они действуют в

келдышевском пространстве. Также мы ввели 2×2 -матрицу P со следующими матричными элементами: $P_{00} = 2$, $P_{01} = -P_{10} = 1$ и $P_{11} = 0$.

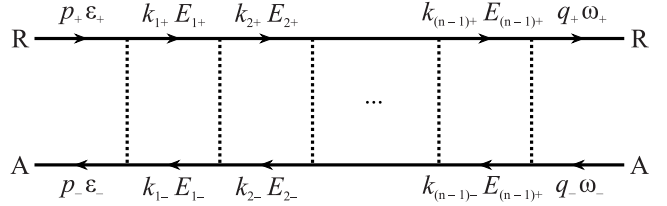


Рис. 2. Лестничная диаграмма для диффузона. Сплошные линии обозначают самосогласованные функции Грина, а штрихованные показывают взаимодействие, индуцированное диссипацией (функции Грина бозона $\mathcal{D}_{\mathbf{p}, \mathbf{a}, \alpha}(\omega)$)

Кроме того, для расчета лестничных диаграмм самосогласованную функцию Грина удобно записать в виде $\mathcal{G}_{\mathbf{p}, \mathbf{a}}(\varepsilon) = \mathcal{G}_{\mathbf{p}, \mathbf{a}}^R(\varepsilon) \Lambda_{\mathbf{a}}^{(+)} + \mathcal{G}_{\mathbf{p}, \mathbf{a}}^A(\varepsilon) \Lambda_{\mathbf{a}}^{(-)}$ с

$$\Lambda_{\mathbf{a}}^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 & s_{\mathbf{a}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_{\mathbf{a}}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & -s_{\mathbf{a}} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Матрицы $\Lambda^{(\pm)}$ являются ортогональными проекторами, $\Lambda^{(+)} \Lambda^{(-)} = \Lambda^{(-)} \Lambda^{(+)} = 0$ и $[\Lambda^{(\pm)}]^2 = \Lambda^{(\pm)}$.

Рассмотрим лестничную диаграмму n -го порядка по $\gamma_{\alpha}^{(\mathbf{a})}$, показанную на рис. 2. Соответствующий вклад в двухчастичную корреляционную функцию (12) определяется следующим выражением:

$$\sum_{\sigma_j = \pm} \sum_{\mu_j \nu_j} \sum_{\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j} \int Y_{\mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1}^{(\sigma_1)}(\mathbf{k}_1) \dots Y_{\mathbf{a}_{n-1} \mathbf{b}_{n-1}}^{(\sigma_{n-1})}(\mathbf{k}_{n-1}) \prod_{j=1}^n \sum_{\mathbf{c}_j, \alpha_j} \times \frac{\gamma_{\alpha_j}^{(\mathbf{c}_j)}}{2} \left\{ P_{\mu_j \nu_j} [\bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{k}_{(j-1)+} \mathbf{k}_j +}^{(\mathbf{c}_j, \alpha_j)}]_{\mathbf{a}_{j-1} \mathbf{a}_j} [\mathcal{L}_{\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_{(j-1)-}}^{(\mathbf{c}_j, \alpha_j)}]_{\mathbf{b}_j \mathbf{b}_{j-1}} \right. \\ \left. + P_{\nu_j \mu_j} [\mathcal{L}_{\mathbf{k}_{(j-1)+} \mathbf{k}_j +}^{(\mathbf{c}_j, \alpha_j)}]_{\mathbf{a}_{j-1} \mathbf{a}_j} [\bar{\mathcal{L}}_{\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_{(j-1)-}}^{(\mathbf{c}_j, \alpha_j)}]_{\mathbf{b}_j \mathbf{b}_{j-1}} \right\} \\ \times \left[\mathcal{G}_{\mathbf{p}_+, \mathbf{a}}(\varepsilon_+) \tau_{\mu_1} \prod_{j=1}^{n-1} \left(\Lambda_{\mathbf{a}_j}^{(\sigma_j)} \tau_{\mu_{j+1}} \right) \mathcal{G}_{\mathbf{q}_+, \mathbf{a}'}(\omega_+) \right]^{\nu \nu'} \\ \times \left[\mathcal{G}_{\mathbf{p}_-, \mathbf{b}}^T(\varepsilon_-) \tau_{\nu_1} \prod_{j=1}^{n-1} \left([\Lambda_{\mathbf{b}_j}^{(-\sigma_j)}]^T \tau_{\nu_{j+1}} \right) \mathcal{G}_{\mathbf{q}_-, \mathbf{b}'}^T(\omega_-) \right]^{\mu \mu'}. \quad (15)$$

Здесь введены обозначения $\omega_{\pm} = \omega \pm \Omega/2$ и $\mathbf{a}_0 = \mathbf{a}$, $\mathbf{a}_n = \mathbf{a}'$, $\mathbf{b}_0 = \mathbf{b}$, $\mathbf{b}_n = \mathbf{b}'$, $\mathbf{k}_0 = \mathbf{p}$, $\mathbf{k}_n = \mathbf{q}$, а также определены функции

$$Y_{\mathbf{ab}}^{(+)}(\mathbf{k}) = \int_E \mathcal{G}_{\mathbf{k}_+, \mathbf{a}}^R(E_+) \mathcal{G}_{\mathbf{k}_-, \mathbf{b}}^A(E_-), \quad (16)$$

$$Y_{\mathbf{ab}}^{(-)}(\mathbf{k}) = \int_E \mathcal{G}_{\mathbf{k}_+, \mathbf{a}}^A(E_+) \mathcal{G}_{\mathbf{k}_-, \mathbf{b}}^R(E_-).$$

Подчеркнем, что для расчета диффузной лестницы в рассматриваемой задаче необходимо интегрировать по промежуточным энергиям, в то время как в случае неупорядоченных фермионов в этом нет необходимости, так как энергия сохраняется при рассеянии на примесном потенциале. Также отметим другое отличие уравнения (15) от диффузной лестницы для примесного рассеяния. В первом случае рассеяние на бозонном поле имеет нетривиальную матричную структуру в пространстве Келдыша, так что диффузная лестница чувствительна к функции распределения. В случае примесного рассеяния причинность функции Грина сохраняется и келдышевская компонента функции Грина не участвует.

Используя структуру проекторов $\Lambda_a^{(\sigma)}$, матрицы P , матриц $\mathcal{L}$ и $\bar{\mathcal{L}}$, можно обнаружить, что выражение (15) значительно упрощается и оказывается ненулевым только для $\mathbf{a} = \mathbf{a}' = \mathbf{b} = \mathbf{b}'$. Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} & 2^n \mathcal{G}_{\mathbf{p}_+, \mathbf{a}}^R(\varepsilon_+) \mathcal{G}_{\mathbf{p}_-, \mathbf{a}}^A(\varepsilon_-) \mathcal{G}_{\mathbf{q}_+, \mathbf{a}}^R(\omega_+) \mathcal{G}_{\mathbf{q}_-, \mathbf{a}}^A(\omega_-) (\Lambda_a^{(+)})^{\nu\nu'} \\ & \times (\Lambda_a^{(-)})^{\mu'\mu} \int_{\mathbf{k}_j} Y_{\mathbf{a}\mathbf{a}}^{(+)}(\mathbf{k}_1) \dots Y_{\mathbf{a}\mathbf{a}}^{(+)}(\mathbf{k}_{n-1}) \\ & \times \prod_{j=1}^n v_{\mathbf{k}_{(j-1)+}} v_{\mathbf{k}_{(j-1)-}}^* [U_{\mathbf{k}_j+}^\dagger \hat{\gamma}^{(a)} U_{\mathbf{k}_j-}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Выполняя суммирование по всем лестничным диаграммам от $n = 1$ до $n = \infty$, получаем следующий результат:

$$\begin{aligned} & 2v_{\mathbf{p}_+} v_{\mathbf{p}_-}^* \mathcal{G}_{\mathbf{p}_+, \mathbf{a}}^R(\varepsilon_+) \mathcal{G}_{\mathbf{p}_-, \mathbf{a}}^A(\varepsilon_-) [U_{\mathbf{q}_+}^\dagger \hat{\gamma}^{(a)} U_{\mathbf{q}_-}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}} \mathcal{G}_{\mathbf{q}_+, \mathbf{a}}^R(\omega_+) \\ & \times \mathcal{G}_{\mathbf{q}_-, \mathbf{a}}^A(\omega_-) (\Lambda_a^{(+)})^{\nu\nu'} (\Lambda_a^{(-)})^{\mu'\mu} \frac{1}{1-f_a(\mathbf{q}, \Omega)}, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$f_a(\mathbf{q}, \Omega) = 2 \int_{\mathbf{k}} Y_{\mathbf{a}\mathbf{a}}^{(+)}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}_+} v_{\mathbf{k}_-}^* [U_{\mathbf{k}_+}^\dagger \hat{\gamma}^{(a)} U_{\mathbf{k}_-}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}}. \quad (19)$$

Вычисляя $Y_{\mathbf{a}\mathbf{a}}^{(+)}(\mathbf{k})$ с помощью (11), находим

$$f_a(\mathbf{q}, \Omega) = \int_{\mathbf{k}} \frac{2iv_{\mathbf{k}_+} v_{\mathbf{k}_-}^* [U_{\mathbf{k}_+}^\dagger \hat{\gamma}^{(a)} U_{\mathbf{k}_-}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}}}{\Omega - s_a \xi_{\mathbf{k}_+} + s_a \xi_{\mathbf{k}_-} + i\bar{\gamma}_a(|v_{\mathbf{k}_+}|^2 + |v_{\mathbf{k}_-}|^2)}. \quad (20)$$

Полагая $\mathbf{q} = \Omega = 0$, получаем $f_a(0, 0) \equiv 1$, т.е. у двухчастичной корреляционной функции в лестничном приближении есть полюс. Наличие такого полюса означает, что соответствующие двухчастичные возбуждения распространяются на большие расстояния. Разлагая функцию $f_a(\mathbf{q}, \Omega)$ по $\mathbf{q}$ и Ω , находим

$$\frac{1}{1-f_a(\mathbf{q}, \Omega)} \simeq \frac{2\bar{\gamma}_a^2 / \int_{\mathbf{k}} ([U_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\gamma}^{(a)} U_{\mathbf{k}}]_{\mathbf{a}\mathbf{a}} / |v_{\mathbf{k}}|^2)}{D_{jl}^{(a)} Q_j Q_l - i\Omega}. \quad (21)$$

Матрица коэффициентов диффузии $D_{jk}^{(a)}$ в общем случае задается громоздким выражением. Заметим, что согласно ур. (20), коэффициент диффузии зануляется для тривиальных моделей, в которых $\xi_{\mathbf{k}}$, $U_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ не зависят от k . Если же одна из этих величин зависит от k , коэффициент диффузии становится отличным от нуля.

В этой работе мы представляем формулу для $D_{jk}^{(a)}$, полученную при следующих упрощениях: (i) функция $v_{\mathbf{k}}$ вещественна и зависит только от $|\mathbf{k}|$; (ii) матрица $\hat{\gamma}^{(a)} = (\bar{\gamma}_a/n) \text{diag}\{1, 1\}$, где $n = \int_{\mathbf{k}}$ — полная плотность частиц; (iii) неабелев векторный потенциал в импульсном пространстве (связность Берри), $\mathcal{A}_j = iU_{\mathbf{k}}^\dagger \partial_{\mathbf{k}_j} U_{\mathbf{k}}$, удовлетворяет условию $\int_{\mathbf{k}} \mathcal{A}_j = 0$. При таких предположениях коэффициенты диффузии принимают вид

$$\begin{aligned} D_{jl}^{(a)} = & \frac{1}{2 \int_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^{-2}} \int_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\delta_{jl}}{\bar{\gamma}_a d} \left[\frac{(\nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}})^2}{|v_{\mathbf{k}}|^4} + 2\bar{\gamma}_a^2 \frac{(\nabla_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}})^2}{v_{\mathbf{k}}^2} \right] \right. \\ & \left. + \left[\bar{\gamma}_a (\mathcal{A}_j \mathcal{A}_l + \mathcal{A}_l \mathcal{A}_j) - \frac{s_a}{v_{\mathbf{k}}^2} (\mathcal{A}_j \partial_{\mathbf{k}_l} \xi_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}_l \partial_{\mathbf{k}_j} \xi_{\mathbf{k}}) \right]_{\mathbf{a}\mathbf{a}} \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Следует отметить, что ненулевой коэффициент диффузии $\propto \bar{\gamma}_a$ появляется даже в случаях плоской зоны $\xi_{\mathbf{q}} = \text{const}$ или в отсутствие гамильтониана $\xi_{\mathbf{q}} = 0$. Отметим, что первый член в правой части ур. (22) соответствует стандартному сценарию, когда коэффициент диффузии определяется кривизной спектра. Второй член в правой части ур. (22) описывает вклад в коэффициент диффузии от дисперсии параметра $v_{\mathbf{k}}$, контролирующего нелокальность рассеяния. Третий вклад в $D_{jl}^{(a)}$ содержит неабелев векторный потенциал в комбинации, похожей на квантовый метрический тензор.

Пример. Для иллюстрации общего результата (22) применим его к модели двухзонного изолятора Черна с числом Черна, равным -1 , предложенной в работе [35]. Гамильтониан этой модели равен $H_0(\mathbf{q}) = \mathbf{d}_{\mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, где $\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = \{2mq_x, 2mq_y, q^2 - m^2\}$. Следовательно, находим $\xi_{\mathbf{q}} = d_{\mathbf{q}} = q^2 + m^2$ и $U_{\mathbf{q}} = (q_x - iq_y \sigma_z - im \sigma_y) / \sqrt{d_{\mathbf{q}}}$. Кроме того, мы выбираем $v_{\mathbf{q}} = \sqrt{d_{\mathbf{q}}}$, что делает связь между фермионными полями $l_{\mathbf{a}}$ и ψ_{α} локальной в пространстве. Тогда, используя (22), мы получаем $D_{jl}^{(a)} = D_a \delta_{jl}$, где

$$D_a = \frac{2}{d\bar{\gamma}_a} \frac{\int_{\mathbf{k}} k^2 / d_{\mathbf{k}}^2}{\int_{\mathbf{k}} 1/d_{\mathbf{k}}} + \bar{\gamma}_a. \quad (23)$$

Для $\bar{\gamma}_u = \bar{\gamma}_d$ приведенное выше выражение было первоначально получено в работе [51].

Обсуждение. Результат самосогласованного борновского приближения для одночастичной

функции Грина предполагает, что релевантный временной масштаб для возбуждений в нашей системе имеет порядок $1/(\bar{\gamma}_a m^2)$. Однако, как и в неупорядоченных системах, существует гораздо большее время, определяющее расплывание плотности частиц. Действительно, двухчастичная корреляционная функция (12) может рассматриваться как функция Грина для линейного уравнения, описывающего временную и пространственную динамику отклонения плотности частиц $\delta n_a(\mathbf{x}, t)$ от темнового состояния с $n_d = 1 - n_u = n$ (см. [51]). Из нашего результата следует, что $\delta n_a(\mathbf{x}, t)$ подчиняется уравнению диффузии. Поскольку уравнения диффузии для $\delta n_u(\mathbf{x}, t)$ и $\delta n_d(\mathbf{x}, t)$ независимы, диффузия может пространственно перераспределить u - и d -частицы в пределах заданной зоны. В частности, если создать возмущение плотностей частиц, они распределятся по системе размера L за время $\sim L^2/D_a$. Однако существует рекомбинация между u -частицами и d -дырками, приводящая к нелинейному члену, $\propto \delta n_u \delta n_d$, который связывает уравнения диффузии. Точный вывод рекомбинационного вклада для рассматриваемой общей модели выходит за рамки нашей работы. Отметим только, что рекомбинация приводит к степенному затуханию возмущения плотности от темнового состояния (подробности см. в работе [51]). Очевидно, что такое медленное затухание может усложнить построение желаемого темнового состояния в реальной условиях эксперимента.

Другим эффектом, также выходящим за рамки нашей статьи, является неустойчивость темнового состояния из-за накачки частиц в u -зону, предсказанная в работе [51] для модели из статьи [35]. В нашем подходе такая неустойчивость темнового состояния должна проявиться как модификация знаменателя (21) после включения диаграмм собственной энергии в диффузионную лестницу, $D_{jl}^{(a)} Q_j Q_l - i\Omega \rightarrow D_{jl}^{(a)} Q_j Q_l - i\Omega + 1/\tau_\phi^{(a)}$. Ненулевая скорость дефазировки диффузона возможна, поскольку диффузионный полюс не защищен сохранением u - или d -фермионов по отдельности. Отрицательный знак скорости расфазировки, $1/\tau_\phi < 0$, мог бы нарушить причинно-следственную связь и указать на нестабильность темнового состояния.

Помимо появления скорости дефазировки, могли бы возникнуть поправки (типа слабой локализации) к коэффициенту диффузии, найденному в рамках лестничного приближения. Источником таких поправок является зависимость собственной энергии диффузона от импульса. Некоторые из соот-

ветствующих диаграмм могут быть представлены в виде взаимодействия нескольких диффузонов. Как известно из рассмотрения неупорядоченных систем, такие диаграммы удобно суммировать с помощью нелинейной сигма-модели. Для модели бесспиновых (однозонных) фермионов, подвергнутых случайным измерениям, такие нелинейные сигма-модели были недавно получены в работах [56–58]. Можно также изучить функцию распределения $Z[\Phi, \bar{\Phi}]$ с помощью нелинейной сигма-модели [58]. Такой вывод нелинейной сигма-модели для обобщенной модели, рассматриваемой в этой статье, является интересной и сложной задачей. Также было бы интересно расширить нашу модель, добавив упругое рассеяние в гамильтониан H_0 . Тогда так же, как в работе [59], можно было бы изучить взаимное влияние упругого и диссипативного рассеяний на коэффициент диффузии.

Наконец, мы отметим, что наши результаты отличаются от результатов работ [47–50] по следующим причинам: (i) наше рассмотрение не ограничено одномерными моделями; (ii) мы показываем, что диффузия появляется даже в отсутствие дисперсии спектра; (iii) мы явно показываем, что физическая причина диффузии – это коррелированное распространение электрон-дырочных пар в каждой из зон.

Выводы. Таким образом, мы исследовали возникновение диффузных возбуждений в динамике обобщенной модели двухзонной диссипативной многочастичной квантовой системы с сохранением общего числа частиц. Получено общее выражение для коэффициента диффузии, определяющего диффузионный полюс в диффузной лестнице для внутризонных частично-дырочных возбуждений. При наличии зонной дисперсии и при $|\bar{\gamma}_a| \ll 1$, коэффициент диффузии обратно пропорционален скорости рассеяния (диссипации), как и ожидалось. В случае плоской зоны или при отсутствии гамильтоновой части динамики коэффициент диффузии по-прежнему отличен от нуля и пропорционален скорости диссипации. Таким образом, наш анализ показывает, что внутризонная диффузия возникает естественным образом в диссипативной динамике, сохраняющей общее число частиц и описываемой уравнением ГКСЛ. Напротив, межзонные двухчастичные возбуждения не являются диффузионными. Они распадаются за время, определяемое скоростью одночастичного распада $\bar{\gamma}_a \xi_q$. Результаты нашей работы открывают множество направлений дальнейших исследований.

Авторы благодарны А. Алтланду, С. Дило, М. Глазову, И. Побойко и Д. Смирнову за полезные обсуждения. Один из авторов выражает благодар-

ность М. Голдштейну, П. Носову и Д. Шапиро за сотрудничество в другом проекте этой тематики.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 22-22-00641.

1. L. M. Sieberer, M. Buchhold, and S. Diehl, Rep. Prog. Phys. **79**, 096001 (2016).
2. K. Le Hur, L. Henriot, L. Herviou, K. Plekhanov, A. Petrescu, T. Goren, M. Schiro, C. Mora, and P. P. Orth, C. R. Phys. **19**, 451 (2018).
3. B. Skinner, J. Ruhman, and A. Nahum, Phys. Rev. X **9**, 031009 (2019).
4. M. S. Rudner and N. H. Lindner, Nat. Rev. Phys. **2**, 229 (2020).
5. F. Thompson and A. Kamenev, Ann. Phys. (N.Y.) **455**, 169385 (2023).
6. W. Lechner and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **111**, 185306 (2013).
7. F. Piazza and P. Strack, Phys. Rev. Lett. **112**, 143003 (2014).
8. J. Keeling, M. J. Bhaseen, and B. D. Simons, Phys. Rev. Lett. **112**, 143002 (2014).
9. E. Altman, L. M. Sieberer, L. Chen, S. Diehl, and J. Toner, Phys. Rev. X **5**, 011017 (2015).
10. C. Kollath, A. Sheikhan, S. Wolff, and F. Brennecke, Phys. Rev. Lett. **116**, 060401 (2016).
11. Z. Leghtas, S. Touzard, I. M. Pop, A. Kou, B. Vlastakis, A. Petrenko, K. M. Sliwa, A. Narla, S. Shankar, M. J. Hatridge, M. Reagor, L. Frunzio, R. J. Schoelkopf, M. Mirrahimi, and M. H. Devoret, Science **347**, 853 (2015).
12. E. G. D. Torre, E. Demler, T. Giamarchi, and E. Altman, Nat. Phys. **6**, 806 (2010).
13. L. M. Sieberer, S. D. Huber, E. Altman, and S. Diehl, Phys. Rev. Lett. **110**, 195301 (2013).
14. J. Raftery, D. Sadri, S. Schmidt, H. E. Türeci, and A. A. Houck, Phys. Rev. X **4**, 031043 (2014).
15. Y. Li, X. Chen, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **98**, 205136 (2018).
16. Y. Li, X. Chen, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **100**, 134306 (2019).
17. S. Roy, J. T. Chalker, I. V. Gornyi, and Y. Gefen, Phys. Rev. Research **2**, 033347 (2020).
18. S. Garratt and J. T. Chalker, Phys. Rev. Lett. **127**, 026802 (2021).
19. S. Diehl, A. Micheli, A. Kantian, B. Kraus, H. P. Buchler, and P. Zoller, Nat. Phys. **4**, 878 (2008).
20. B. Kraus, H. P. Buchler, S. Diehl, A. Kantian, A. Micheli, and P. Zoller, Phys. Rev. A **78**, 042307 (2008).
21. F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, Nat. Phys. **5**, 633 (2009).
22. H. Weimer, M. Muller, I. Lesanovsky, P. Zoller, and H. P. Buchler, Nat. Phys. **6**, 382 (2010).
23. S. Diehl, E. Rico, M. A. Baranov, and P. Zoller, Nat. Phys. **7**, 971 (2011).
24. C.-E. Bardyn, M. A. Baranov, E. Rico, A. Imamoglu, P. Zoller, and S. Diehl, Phys. Rev. Lett. **109**, 130402 (2012).
25. C.-E. Bardyn, M. A. Baranov, C. V. Kraus, E. Rico, A. Imamoglu, P. Zoller, and S. Diehl, New J. Phys. **15**, 085001 (2013).
26. J. Otterbach and M. Lemesko, Phys. Rev. Lett. **113**, 070401 (2014).
27. R. König and F. Pastawski, Phys. Rev. B **90**, 045101 (2014).
28. N. Lang and H. P. Buchler, Phys. Rev. A **92**, 012128 (2015).
29. J. C. Budich, P. Zoller, and S. Diehl, Phys. Rev. A, **91** 042117 (2015).
30. F. Iemini, D. Rossini, R. Fazio, S. Diehl, and L. Mazza, Phys. Rev. B **93**, 115113 (2016).
31. L. Zhou, S. Choi, and M. D. Lukin, arXiv:1706.01995 [quant-ph] (2017).
32. Z. Gong, S. Higashikawa, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **118**, 200401 (2017).
33. M. Goldstein, SciPost Physics **7**, 67 (2019).
34. G. Shavit and M. Goldstein, Phys. Rev. B **101**, 125412 (2020).
35. F. Tonielli, J. C. Budich, A. Altland, and S. Diehl, Phys. Rev. Lett. **124**, 240404 (2020).
36. T. Yoshida, K. Kudo, H. Katsura, and Y. Hatsugai, Phys. Rev. Research **2**, 033428 (2020).
37. M. Gau, R. Egger, A. Zazunov, and Y. Gefen, Phys. Rev. Lett. **125**, 147701 (2020).
38. M. Gau, R. Egger, A. Zazunov, and Y. Gefen, Phys. Rev. B **102**, 134501 (2020).
39. S. Bandyopadhyay and A. Dutta, Phys. Rev. B **102**, 184302 (2020).
40. R. A. Santos, F. Iemini, A. Kamenev, and Y. Gefen, Nat. Commun. **11**, 5899 (2020).
41. A. Altland, M. Fleischhauer, and S. Diehl, Phys. Rev. X **11**, 021037 (2021).
42. A. Beck and M. Goldstein, Phys. Rev. B **103**, L241401 (2021).
43. A. Nava, G. Campagnano, P. Sodano, and D. Giuliano, Phys. Rev. B **107**, 035113 (2023).
44. G. Shkolnik, A. Zabalo, R. Vasseur, D. A. Huse, J. H. Pixley, and S. Gazit, arXiv:2308.03844.
45. G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).
46. V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976).
47. M. Esposito and P. Gaspard, J. Stat. Phys. **121**, 463 (2005).
48. O. A. Castro-Alvaredo, B. Doyon, and T. Yoshimura, Phys. Rev. X **6**, 041065 (2016).

49. A. Dhar and H. Spohn, C. R. Phys. **20**, 393 (2019).
50. T. Jin, J. S. Ferreira, M. Filippone, and T. Giamarchi, Phys. Rev. Research **4**, 013109 (2022).
51. P. A. Nosov, D. S. Shapiro, M. Goldstein, and I. S. Burmistrov, Phys. Rev. B **107**, 174312 (2023).
52. A. Kamenev and A. Levchenko, Adv. Phys. **58**, 197 (2009).
53. B. Buča and T. Prosen, New J. Phys. **14**, 073007 (2012).
54. V. V. Albert and L. Jiang, Phys. Rev. A **89**, 022118 (2014).
55. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
56. Q. Yang, Y. Zuo, and D. E. Liu, arXiv:2207.03376.
57. M. Fava, L. Piroli, T. Swann, D. Bernard, and A. Nahum, arXiv:2302.12820.
58. I. Poboiko, P. Pöpperl, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, arXiv:2304.03138.
59. F. S. Lozano-Negro, E. A. Navarro, N. C. Chávez, F. Mattiotti, F. Borgonovi, H. M. Pastawski, and G. L. Celardo, arXiv:2307.05656.

Gravity through the prism of condensed matter physics

G. E. Volovik¹⁾

Low Temperature Laboratory, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland

Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 24 August 2023

Resubmitted 2 September 2023

Accepted 2 September 2023

DOI: 10.31857/S1234567823190126, EDN: xskopf

In the paper “Life, the Universe, and everything – 42 fundamental questions” [1], Roland Allen and Suzy Lidström presented personal selection of the fundamental questions. Here, based on the condensed matter experience, we suggest the answers to some questions concerning the vacuum energy, black hole entropy and the origin of gravity. In condensed matter we know both the many-body phenomena emerging on the macroscopic level and the microscopic (atomic) physics, which generates this emergence. It appears that the same macroscopic phenomenon may be generated by essentially different microscopic backgrounds. This points to various possible directions in study of the deep quantum vacuum of our Universe.

There are at least 6 different scenarios of emergent gravity, which are supported by the condensed matter examples, and it is not clear which of them (if any) is preferred by Nature:

(1) In the Akama–Diakonov theory [2, 3] the gravitational tetrads emerge as the order parameter of symmetry breaking phase transition, the vacuum expectation value of fermionic operators:

$$e_\mu^a = \langle \hat{E}_\mu^a \rangle, \quad \hat{E}_\mu^a = \frac{1}{2} \left(\Psi^\dagger \gamma^a \partial_\mu \Psi - \Psi^\dagger \overleftarrow{\partial}_\mu \gamma^a \Psi \right). \quad (1)$$

This scenario is supported by the condensed matter example. The vielbein emerges as the order parameter and metric emerges as fermionic quartet in the spin-triplet p -wave superfluid ${}^3\text{He-B}$ [4].

(2) Tetrads emerge together with Weyl fermions and gauge fields in the vicinity of the topological Weyl points in the energy spectrum of fermionic quasiparticles [5, 6]. The expansion of the 2×2 Hamiltonian for fermionic quasiparticles near the Weyl point at $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$ gives

$$H \approx e_a^i \sigma^a (p_i - p_i^0). \quad (2)$$

Here σ^a are Pauli matrices; the spacetime dependent matrix e_a^i plays the role of the effective triad field; and

the spacetime dependent vector $\mathbf{p}^0$ plays the role of the vector potential of the effective $U(1)$ gauge field. This scenario takes place in the Weyl superfluid ${}^3\text{He-A}$ and now is intensively discussed in Weyl semimetals.

(3) The gravitational tetrads may emerge as the elasticity tetrads, which describe the elasticity theory in crystals [7, 8]. In this approach, an arbitrary deformed crystal structure can be described as a system of three crystallographic surfaces, Bragg planes, of constant phase $X^a(x) = 2\pi n^a$, $n^a \in \mathbb{Z}$ with $a = 1, 2, 3$. The intersections of the surfaces

$$X^1(\mathbf{r}, t) = 2\pi n^1, \quad X^2(\mathbf{r}, t) = 2\pi n^2, \quad X^3(\mathbf{r}, t) = 2\pi n^3, \quad (3)$$

represent the lattice points of a deformed crystal. In the continuum limit, the elasticity triads are gradients of the phase functions:

$$E_i^a(x) = \partial_i X^a(x) \quad i = x, y, z, \quad a = 1, 2, 3. \quad (4)$$

(4) The metric may emerge from the non-quadratic vielbein. The dimension of spin space in the vielbein matrix can be smaller or larger than the dimension of coordinate space. Example of the latter is the 4×5 vielbein with dimension 5 of the spin space, which takes place in the planar phase of superfluid ${}^3\text{He}$ [9]. Such scenario can be extended to the Akama–Diakonov gravity. In this scenario one may have continuous change of the signature of the metric [9]. Dynamical signature has been also discussed in Ref. [10].

(5) The broken symmetry may lead to formation of different tetrads for different fermionic species [11]. If Minkowski vacuum is degenerate with respect to discrete symmetries [12], one may have separate tetrads: i) tetrads for left fermions; ii) tetrads for right fermions; iii) tetrads for left antiparticles; and iv) tetrads for right antiparticles [13]. This serves as the multi-tetrad extension of bi-metric gravity introduced by Rosen [14].

(6) The scenario with complex tetrads takes place in the B-phase of superfluid ${}^3\text{He}$ [4]. The possible realization in gravity is in [15].

¹⁾e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

In all six scenarios of emergent gravity, tetrads are the primary emergent objects, while metric is the secondary object, which is the bilinear form of tetrads. This would mean that geometry is the secondary emergent phenomenon. Whatever scenario (if any) is preferred by Nature, the gravity is not described by Einstein metric theory and requires the extended theory in terms of tetrads such as the Einstein–Cartan–Sciama–Kibble theory [16]. There are the condensed matter scenarios, in which metric emerges as primary object, such as acoustic metric in moving liquid [17, 18]. These analogs of gravity do not describe the interaction of gravity with fermions, and cannot serve as the guiding rule for constructing the quantum gravity. But they are useful for the experimental simulations of different effects related to quantum gravity [19].

Scenarios (1) and (2) suggest very different origins of quantum gravity. However, they have similar predictions for the number of fermionic degrees of freedom in quantum vacuum. In the Diakonov theory, where the original action is the product of 8 fermionic operators, the grand unification with symmetry $SO(16)$ is suggested. This fits four generations of the Standard Model with 16 Weyl fermions in one generation [3]. The Weyl point scenario is realized, in particular, in superconductors of class $O(D_2)$ [20, 21]. In this superconductor, there are 8 Weyl points in the energy spectrum, which form cube in 3D momentum space giving rise to 8 Weyl fermions. In the 4D extension [22, 23] the Weyl nodes may form the 4D cube in the momentum-frequency space, which results in 16 Weyl fermions. The numbers 2^N also follow from the topological analysis of condensed matter systems. If the vacuum of Standard Model is considered as topological Weyl semimetal, the maximal number of massless fermions in the symmetric phase is $16g$, where g is number of generations [24]. The group Z_{16} also appears in the classification of topological phases in $3+1$ dimension [25].

We also discuss the condensed matter views on the cosmological constant problem and black hole thermodynamics. In particular, the answer to the question “Why does conventional physics predict a cosmological constant that is vastly too large?” [1] is the following. The so-called conventional physics ignores the condensed matter lesson that in the full equilibrium the diverging zero-point energy of quantum fields is cancelled by the atomic (trans-Planckian) degrees of free-

dom. The reason for cancellation is the general laws of thermodynamics, which are the same for relativistic and non-relativistic vacua (ground states).

This work has been supported by Academy of Finland (grant 332964).

This is an excerpt of the article “Gravity through the prism of condensed matter physics”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023602683

1. R. E. Allen and S. Lidström, Phys. Scr. **92**, 012501 (2017).
2. K. Akama, Prog. Theor. Phys. **60**, 1900 (1978).
3. D. Diakonov, arXiv:1109.0091.
4. G. E. Volovik, Physica B **162**, 222 (1990).
5. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
6. P. Hořava, Phys. Rev. Lett. **95**, 016405 (2005).
7. I. E. Dzyaloshinskii, and G. E. Volovick, Ann. Phys. **125**, 67 (1980).
8. J. Nissinen and G. E. Volovik, Phys. Rev. Research **1**, 023007 (2019).
9. G. E. Volovik, Ann. Phys. **447**, 168998 (2022).
10. S. Bondarenko and M. A. Zubkov, JETP Lett. **116**, 54 (2022).
11. Al. Parhizkar and V. Galitski, Phys. Rev. Research **4**, L022027 (2022).
12. S. N. Vergeles, Class. Quantum Gravity **38**, 085022 (2021).
13. G. E. Volovik, J. Low Temp. Phys. **206**, 1 (2022).
14. N. Rosen, Phys. Rev. **57**, 147 (1940).
15. S. Bondarenko, Universe **8**, 497 (2022).
16. F. W. Hehl, arXiv:2303.05366.
17. W. G. Unruh, Phys. Rev. Lett. **46**, 1351 (1981).
18. M. Visser, Class. Quantum Gravity **15**, 1767 (1998).
19. S. L. Braunstein, M. Faizal, L. M. Krauss, F. Marino, and N. A. Shah, Nat. Rev. Phys. (2023); <https://doi.org/10.1038/s42254-023-00630-y>.
20. G. E. Volovik and L. P. Gor'kov, JETP **61**, 843 (1985).
21. G. E. Volovik, JETP Lett. **105**, 273 (2017).
22. M. Creutz, J. High Energy Phys. **0804**, 017 (2008).
23. M. Creutz, Ann. Phys. **342**, 21 (2014).
24. G. E. Volovik and M. A. Zubkov, New J. Phys. **19**, 015009 (2017).
25. Ch.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and Sh. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 118

Выпуск 8

25 октября 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора
Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

Интернет-версия английского издания
<http://www.springerlink.com/content/1090-6487>

Эксперимент по высокоэффективному отклонению протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом на синхроциклотроне ПИЯФ

Д. А. Амерканов⁺, Л. А. Вайшнине⁺, Ю. А. Гавриков⁺, Б. Л. Горшков⁺, А. С. Денисов⁺, Е. М. Иванов⁺,
П. Ю. Иванова^{+,*}, Ю. М. Иванов⁺¹⁾, М. А. Кознов⁺, В. И. Мурзин⁺, Л. А. Щипунов⁺

⁺Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, 188300 Гатчина, Россия

* Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 8 сентября 2023 г.

После переработки 8 сентября 2023 г.

Принята к публикации 10 сентября 2023 г.

В представленном эксперименте впервые наблюдалось отклонение протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом кремния длиной 1 мм на угол (3.0 ± 0.1) мрад с эффективностью (32 ± 3) % при торцевом захвате в каналирование. Разработанный кристаллический дефлектор допускает увеличение угла отклонения пучка и может быть использован для получения малоинтенсивных пучков при промежуточных энергиях.

DOI: 10.31857/S1234567823200016, EDN: oqsbht

Введение. Каналирование заряженных частиц изогнутыми кристаллами, основы которого подробно освещены в обзоре [1], в настоящее время успешно используется для управления и формирования пучков на ускорителях высоких и сверхвысоких энергий. Например, на ускорителе У-70 в ИФВЭ более половины операционного времени работают пучки, связанные с кристаллическим выводом из ускорительного кольца или кристаллическим расщеплением выведенных пучков [2]. На ускорительном комплексе LHC в CERN исследуется применение кристаллов в системе медленного вывода пучка 400 ГэВ протонов из ускорителя SPS [3, 4] и в системе коллимации пучков LHC [5].

Несмотря на значительные достижения в использовании кристаллов при высоких и сверхвысоких энергиях, в области промежуточных энергий кристаллы практически не применяются. Основная проблема связана с тем, что с уменьшением энергии протонов длина деканалирования в кристалле уменьшается. Экспериментальные данные по деканалированию протонов, собранные в [6], показывают близкий к линейному характер зависимости длины деканалирования от энергии. Единственный результат в области промежуточных энергий был получен в эксперименте по поиску объемного захвата 1 ГэВ протонов в изогнутом кристалле [7], длина деканалирова-

ния для (111) плоскостей в нем была найдена равной (1.26 ± 0.09) мм [8, с. 158]. С тех пор новых экспериментальных данных по деканалированию для промежуточных энергий, насколько нам известно, не появилось.

Величина длины деканалирования влияет на эффективность отклонения заряженных частиц изогнутым кристаллом. Эффективность определяется как отношение числа отклоненных частиц к числу упавших на кристалл и оценивается (при торцевом захвате) произведением геометрического аксептанса плоскостного канала на экспоненту затухания каналированного пучка из-за рассеяния на электронах в канале. Например, в опытах по объемному захвату [7, 8] применялся кристалл длиной 10 мм, изогнутый на 21 мрад наклеиванием на стеклянный цилиндр радиусом 46 см. При такой длине из-за деканалирования эффективность отклонения параллельного пучка кристаллом не превышает 0.01 %. Уменьшение же длины кристалла с целью увеличения эффективности уменьшает предельный угол изгиба, что ухудшает пространственное разделение падающего и каналированного пучков. В опытах по объемному отражению 1 ГэВ протонов [9] применялся кристалл длиной по пучку 30 микрон, эффективность каналирования составила 63 %, но угол отклонения был равен 0.4 мрад. Для упругоквазимоэаичного способа изгиба [10], использованного в этих опытах, полученное отклонение близко к практическому пределу, опре-

¹⁾e-mail: ivanov_yu@npni.nrcki.ru

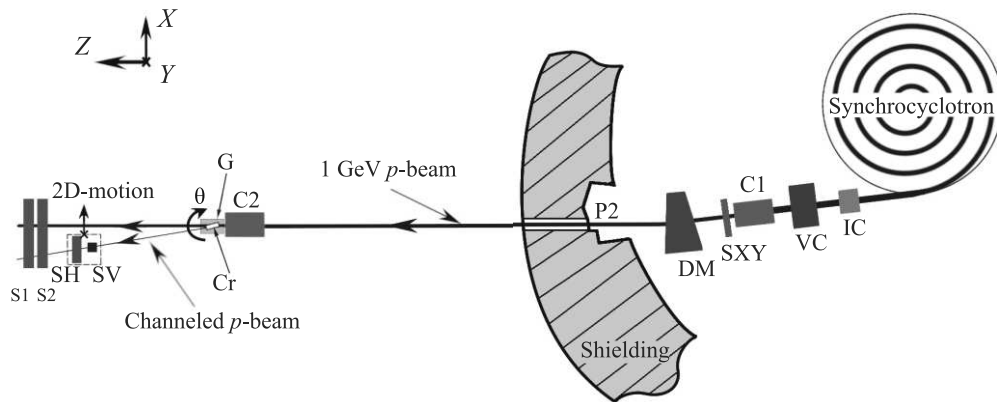


Рис. 1. (Цветной онлайн) Расположение экспериментальной установки. Показана система координат XYZ , связанная с пучком. Направление осей X и Y соответствует рабочему ходу блока детекторов SV-SH, ось Z направлена по пучку

деляемому прочностью материала, и не зависит от размера кристалла в направлении пучка.

В настоящей статье представлены результаты экспериментального исследования, подготовленного и выполненного в 2019–2023 гг., в котором изогнутым кристаллом длиной 1 мм протонный пучок был отклонен на угол 3 мрад с эффективностью 32%, что позволяет рассматривать созданный кристаллический дефлектор как прототип кристаллических устройств для развития пучковой инфраструктуры синхроциклотрона ПИЯФ.

Методика эксперимента. В проведенном исследовании было применено такое же расположение экспериментальной установки (рис. 1), как в опытах по поиску объемного отражения [9]. Пучок протонов с энергией 1 ГэВ, медленно выведенный из синхроциклотрона, проходил ионизационную камеру IC, служившую монитором интенсивности выведенного пучка, вертикальный магнит-корректор VC и попадал в коллиматор C1 с проходным отверстием $10 \times 10 \text{ мм}^2$. Положение и профиль пучка после коллиматора C1 проверялись сканером SXY. Поворотный магнит DM направлял пучок в канал P2 экспериментального зала, в котором был установлен коллиматор C2 с проходным отверстием (XY на рис. 1) $4 \times 1 \text{ мм}^2$.

Расстояние между коллиматорами C1 и C2 равнялось 31 м, между коллиматором C2 и детекторами – 5 м. Протонный канал от коллиматора C1 до детекторов откачивался до давления несколько миллибар. Окно на выходе канала было выполнено из каптоновой пленки толщиной 60 мкм.

Поворотное устройство G с кристаллом Cr было закреплено внутри протонного канала на выходной стороне коллиматора C2 и обеспечивало враще-

ние кристалла с шагом 4 мкрад в угловом диапазоне ± 10 мрад. За выходным окном канала на воздухе были расположены сцинтилляционные детекторы SV, SH, S2 и S1 (перечислены в направлении пучка). Детекторы SV и SH служили для измерения поперечного распределения протонов, детекторы S2 и S1 – для измерения интегральной интенсивности пучка.

Детекторы SV и SH были изготовлены из сцинтилляционного пластика в форме пластинок с размерами (XYZ на рис. 1) $1.5 \times 4.0 \times 7.0 \text{ мм}^3$ и $9.6 \times 1.5 \times 7.0 \text{ мм}^3$, соответственно, и установлены ортогонально друг другу в смежных светоизолированных камерах, образуя перекрестие в проекции на плоскость, перпендикулярную оси пучка. Сцинтилляции в каждой из камер регистрировались отдельными фотумножителями ФЭУ-140 в режиме малофотонного счета. Фотоны из пластика собирались ФЭУ через воздушный зазор в камерах без применения световодов. Блок с детекторами SV и SH помещался на столике, оборудованном дистанционно управляемой системой X - и Y -перемещений. Диапазон перемещений составлял 100 мм с погрешностью позиционирования 1 мкм. Блок детекторов SV-SH для измерения поперечного распределения протонов показан на рис. 2. За ним далее по пучку располагались пластиковые сцинтилляционные детекторы S2 и S1 с размерами (XYZ) $60 \times 60 \times 10 \text{ мм}^3$, позволявшими регистрировать протоны прямого и каналированного пучков, включая рассеянные на малые углы в кристалле, остаточном воздухе, окошках, сцинтилляционных пластиках (потери из-за ядерных взаимодействий малы). Время формирования импульсов во всех детекторных каналах не превышало 10 нс.

Выстройка аппаратуры на ось пучка проводилась путем облучения последовательности конвертов

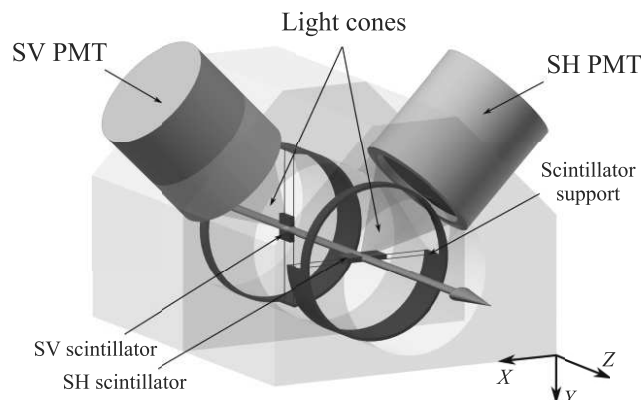


Рис. 2. (Цветной онлайн) Блок детекторов SV-SH

с фотобумагой, юстировки по отпечаткам пучка двух лазеров, задающих горизонтальную и вертикальную световые плоскости, до совпадения в пределах 1 мм линии пересечения плоскостей с осью пучка, последующего выставления на линию пересечения элементов установки.

Электроника экспериментальной установки позволяла выполнить необходимые в процессе измерений перемещения элементов и обеспечивала сбор физических данных. По завершении заданной экспозиции в очередном положении управляющая программа записывала дату, время, линейное положение X , линейное положение Y , угловое положение θ , длительность набора данных, число зарегистрированных импульсов в каналах S1, S2, S1&S2, SH, SV, SH&SV.

В эксперименте использовались три типа измерений. Линейный X -скан детекторами SV-SH при фиксированном линейном положении Y и фиксированном угловом положении θ кристалла Сг, линейный Y -скан детекторами SV-SH при фиксированном линейном положении X и фиксированном угловом положении θ кристалла Сг, угловой θ -скан кристаллом при фиксированных X - и Y -положениях детекторов SV-SH. Эти измерения позволяли полностью решить задачи поиска каналирования и определения характеристик прямого и отклоненного пучков.

Изогнутый кристалл для каналирования протонов с энергией 1 ГэВ. Рабочий кристалл для эксперимента был изготовлен в ПИЯФ из слитка бездислокационного монокристаллического кремния. В качестве каналирующих плоскостей были выбраны атомные плоскости (110), имеющие высокий геометрический аксептанс при торцевом захвате в режим каналирования. Для изгиба был использован антикластический эффект, позволяющий вынести места

закрепления кристалла за пределы пучка и обеспечивающий высокую однородность кривизны изгиба (рис. 3). Впервые антикластический изгиб для каналирования заряженных частиц высоких энергий был применен в [11].

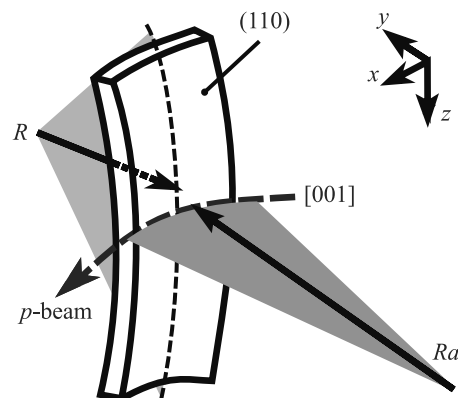


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема изгиба кристалла. Показана система координат xyz пластинки и ориентация кристаллической решетки

Монокристаллический кремний является анизотропным материалом, свойства которого зависят от направления. Аналитически изгиб анизотропных тел был исследован Voigt'ом [12]. В частности, им были получены решения для растяжения, изгиба и кручения анизотропного стержня с эллиптическим сечением. Эти решения приведены в книге Лехницкого [13] и были применены Сумбаевым [14] для объяснения упругоквазимозаичного эффекта при дифракции гамма-излучения на упруго изогнутых пластинах кварца в фокусирующих кристалл-дифракционных спектрометрах. Хорошее согласие расчетов Сумбаева с экспериментом [15] подтвердило применимость модели. Позднее Самсонов [16] использовал это же приближение для описания антикластического изгиба и некоторых других эффектов в изогнутых анизотропных пластинках различной ориентации, которые также были подтверждены экспериментально [17].

Выражение, описывающее форму срединного сечения кристаллической полоски, изогнутой по радиусу R , в системе координат xyz на рис. 3 имеет вид:

$$y = \frac{z^2}{2R} - \frac{x^2}{2R_a},$$

где R_a – наведенный антикластический радиус изгиба, определяемый выражением (для анизотропии общего вида):

$$R_a = R \frac{S_{35}^2 - S_{33}S_{55}}{S_{13}S_{55} - S_{15}S_{35}},$$

в котором S_{13} , S_{33} , S_{35} , S_{55} – константы упругости, вычисленные с учетом ориентации пластинки относительно кристаллографических осей. Если изгиб не сопровождается кручением ($S_{35} = 0$), это упрощает формулу до использованной в [18]:

$$R_a = R \frac{-S_{33}}{S_{13}}.$$

В случае монокристаллического кремния отношение R_a/R имеет минимум для вырезки, при которой атомная плоскость (110) совпадает со срединным сечением, а ось [001] – с пучком, как показано на рис. 3. Эта вырезка была применена при изготовлении пластинок.

Длина пластинок в направлении пучка была выбрана равной 1 мм. Это соответствует длине деканалирования (110) плоскостей, полученной пересчетом измерения [8] длины деканалирования (111) плоскостей по модели [19], предсказывающей линейную зависимость длины деканалирования от межплоскостного расстояния. Высота рабочих пластинок, определяемая размерами падающего на кристалл пучка и мест крепления кристалла, выбрана равной 30 мм. Толщина пластинок t определяет предельный радиус изгиба без риска разрушения. На основе опыта критический радиус изгиба обычно принимается равным $1000t$. Поскольку уменьшение толщины t пропорционально уменьшает интенсивность каналированного пучка, было выбрано значение 0.1 мм, при котором интенсивность отклоненного пучка все еще значительно превышает фон от коллиматора С2, а антикластический изгиб имеет заметную величину, достаточную для разделения пучков. При выбранной толщине и ориентации пластинки радиус антикластического изгиба может достигать 300 мм. Это значение много больше критического радиуса изгиба для каналирования (радиуса Цыганова) протонов с энергией 1 ГэВ, равного 2.7 мм, поэтому влиянием изгиба на эффективность отклонения частиц можно пренебречь.

В ходе подготовки эксперимента была изготовлена серия плоскопараллельных пластинок (полосок) с размерами (xyz) $1.0 \times 0.1 \times 30.0$ мм³. Все четыре длинные грани каждой пластинки были глубоко полированы с финишным зерном 0.25 мкм. Полученная плоскостность больших граней 30.0×1.0 мм² была лучше 0.5 мкм, угол склонения больших граней и плоскости (110) был меньше 50 мкрад.

Процесс изгиба кристалла в изгибающем устройстве контролировался оптически по изменению угла отражения лазерного луча от изогнутого кристалла при линейном перемещении сборки, а так-

же по дифракции рентгеновского излучения. Угол изгиба, обусловленный антикластическим эффектом, найденный из рентгеновских измерений, равен (2.9 ± 0.1) мрад.

Результаты измерений. На рисунке 4 показан линейный X -скан, пересекающий прямой и отклоненный пучки при Y в центре прямого пучка и θ в максимуме каналирования. По горизонтальной оси отложено X -положение в мм, по вертикальной оси – счеты совпадений SH&SV за 10 с. Изменения интенсивности протонного пучка в процессе сканирования учтены поправкой счетов SH&SV по показаниям детекторов S2 и S1. По результатам фитирования пиков угол отклонения каналированных протонов найден равным (3.0 ± 0.1) мрад. Он получен сложением расстояния между центрами прямого и отклоненного пучков 14 мм со смещением кристалла относительно центра прямого пучка 0.9 мм и делением суммы на расстояние между кристаллом и детектором SV, равное 5 м. Найденное значение принято за величину антикластического изгиба кристалла. Оно согласуется в пределах ошибки с рентгеновскими данными.

Для определения эффективности отклонения протонов кристаллом были выполнены многократные линейные X – Y -сканирования пучков, из анализа которых определено отношение интегральных потоков отклоненного и прямого пучков, равное 1/100. В случае соосности коллиматора С2 и протонного пучка, на кристалл должна попадать 1/40 часть от числа прошедших коллиматор протонов, которая равна отношению толщины кристалла 0.1 мм к ширине отверстия коллиматора 4 мм. Анализ измеренных распределений и моделирование прохождения протонов через коллиматор привели к заключению о наличии небольшого угла между осями коллиматора и пучка, из-за которого ширина прохода 4 мм уменьшилась до 3.2 мм. С учетом этой поправки эффективность отклонения протонов кристаллом найдена равной (32 ± 3) %.

Анализ результатов и выводы. Для равномерного распределения падающих на кристалл протонов в интервале углов $\pm\Phi$ эффективность отклонения ε определяется выражением [1, 20]:

$$\varepsilon = \frac{2x_c}{d_p} \frac{\pi}{4} \frac{\theta_c}{\Phi} e^{-\frac{l}{\lambda_d}},$$

где $d_p = 1.92 \text{ \AA}$ – ширина плоскостного (110) канала, $x_c = d_p/2 - 2.5u_T$ – критическая полуширина канала устойчивого каналирования, $u_T = 0.075 \text{ \AA}$ – средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кремния, l – длина кристалла по пучку, λ_d – длина деканалирования.

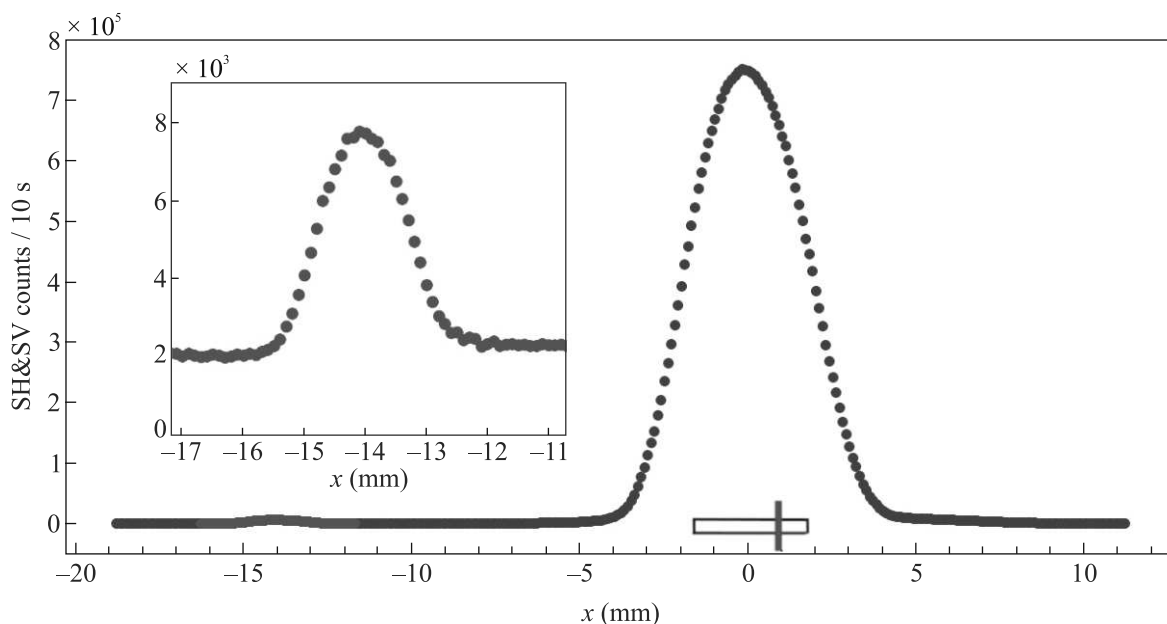


Рис. 4. (Цветной онлайн) Линейный X-скан прямого и каналированного пучков. Снизу пика прямого пучка показано положение кристалла относительно эффективного отверстия коллиматора С2

Принимая критический угол каналирования θ_c равным 139 мкрад, что соответствует критической поперечной энергии каналирования $E_c(x_c) = 14.32$ эВ (см. [20]), и оценивая расходимость пучка Φ величиной 161 мкрад по полуразмеру отверстия коллиматора С1, находим значение длины деканалирования λ_d , равное (1.9 ± 0.3) мм.

Найденное значение соответствует торцевому захвату в режим каналирования и заметно отличается от оценки длины деканалирования 1 мм, полученной пересчетом результата эксперимента по объемному захвату [8]. По-видимому, это свидетельствует о различии процессов деканалирования при торцевом и объемном захвате. Объяснение может состоять в том, что при торцевом захвате заселяются все состояния каналирования, а в случае объемного захвата заселяются преимущественно верхние состояния, которые деканалируют быстрее.

Большее значение длины деканалирования при торцевом захвате позволяет применить более длинные в направлении пучка кристаллы и тем самым увеличить угол отклонения частиц. Это, в свою очередь, делает возможной постановку задачи о кристаллическом выводе пучка из 1 ГэВ протонного синхротрона ПИЯФ.

Авторы выражают благодарность дирекции Отделения физики высоких энергий за поддержку, сотрудникам Ускорительного отдела за сотрудничество и помощь при проведении экспериментов.

1. V.M. Biryukov, Yu.A. Chesnokov, and V.I. Kotov, *Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators*, Springer, Berlin (1997).
2. Yu.A. Chesnokov, A.G. Afonin, V.T. Baranov, G.I. Britvich, P.N. Chirkov, V.A. Maisheev, D.A. Savin, and V.I. Terekhov, JETP **127**, 115 (2018).
3. L.S. Esposito, P. Bestmann, M. Butcher et al. (Collaboration UA9), *Crystal for slow extraction loss-reduction of the SPS electrostatic septum*, 10th International Particle Accelerator Conference, JACoW Publishing, Geneva, Switzerland (2019), p. 2379.
4. F.M. Velotti, P. Bestmann, M. Butcher et al. (Collaboration UA9), *Demonstration of loss reduction using a thin bent crystal to shadow an electrostatic septum during resonant slow extraction*, 10th International Particle Accelerator Conference, JACoW Publishing, Geneva, Switzerland (2019), p. 3399.
5. W. Scandale, G. Arduini, R. Assmann et al. (Collaboration UA9), Int. J. Mod. Phys. A **37**, 2230004 (2022).
6. R.A. Carrigan, Jr., *Phenomenological Summary of Dechanneling in Aligned Single Crystals*, FNAL preprint FN-454, 1 (1987).
7. V.A. Andreev, V.V. Baublis, E.A. Damaskinskii et al. (Collaboration), JETP Lett. **36**, 415 (1982).
8. V.M. Samsonov, *The Leningrad experiment on volume capture*, in Relativistic Channeling NATO ASI series B: Physics **165**, 129 (1987).

9. Yu. M. Ivanov, N. F. Bondar', Yu. A. Gavrikov, A. S. Denisov, A. V. Zhelamkov, V. G. Ivochkin, S. V. Kos'yanenko, L. P. Lapina, A. A. Petrunin, V. V. Skorobogatov, V. M. Suvorov, A. I. Shchetkovsky, A. M. Taratin, and W. Scandale, JETP Lett. **84**, 372 (2006).
10. Yu. M. Ivanov, A. A. Petrunin, and V. V. Skorobogatov, JETP Lett. **81**, 99 (2005).
11. A. G. Afonin, V. M. Biryukov, V. A. Gavrilushkin et al. (Collaboration), JETP Lett. **67**, 781 (1998).
12. W. Voigt, *Lehrbuch der Kristallphysik*, Teubner, Leipzig (1910).
13. С. Г. Лехницкий, *Теория упругости анизотропного тела*, Гостехиздат, М. (1950).
14. O. I. Sumbaev, Soviet Physics JETP **5**, 1042 (1957).
15. O. I. Sumbaev, Soviet Physics JETP **27**, 724 (1968).
16. В. М. Самсонов, *Изгиб пластины в фокусирующих кристалл-дифракционных рентгеновских и гамма-спектрометрах*, препринт ЛИЯФ-278 (1976).
17. В. М. Самсонов, Е. Г. Лапин, *О нескольких возможностях и особенностях использования изогнутого кристалла в кристалл-дифракционных приборах*, препринт ЛИЯФ-587 (1980).
18. V. Guidi, L. Lanzoni, and A. Mazzolari, J. Appl. Phys. **107**, 113534 (2010).
19. V. M. Biryukov, Yu. A. Chesnokov, N. A. Galyaev, V. I. Kotov, I. V. Narsky, S. V. Tsarik, V. N. Zapolsky, O. L. Fedin, M. A. Gordeeva, Yu. P. Platonov, and A. I. Smirnov, NIM B **86**, 245 (1994).
20. А. М. Таратин, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **29**, 1063 (1998).

Измерение энергии 8.3-эВ изомера ^{229}Th с помощью фотоэффекта

Ф. Ф. Карпешин¹⁾

Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии имени Д. И. Менделеева (ВНИИМ),
190005 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 сентября 2023 г.

После переработки 18 сентября 2023 г.

Принята к публикации 18 сентября 2023 г.

Предлагается использовать фотоэффект на внутренних s -оболочках атома ^{229}Th для уточнения энергии его 8.3-эВ изомера. Расчет выполнен по теории встряски Фейнберга–Мигдала, которая приводит к вероятности образования изомера вплоть до 0.5×10^{-3} на K -оболочке. В результате в спектре фотоэлектронов предсказываются две линии, измерение расстояния между которыми покажет энергию изомера. Обсуждаются и другие пути применения метода для изучения свойств изомера: через встряску при формировании радиоактивных пучков на накопительных кольцах и др. Более того, регистрация эффекта в эксперименте позволит уточнить его парциальное время жизни.

DOI: 10.31857/S1234567823200028, EDN: oqtuly

В настоящее время наиболее точные атомные часы основаны на сверхтонком взаимодействии электронной оболочки атома с ядром. Рекордные экземпляры достигают относительной погрешности воспроизведения единицы частоты (времени) в пределах нескольких единиц 10^{-18} [1]. Этого недостаточно как для фундаментальных целей подобно определению дрейфа фундаментальных констант, детектирования сверхлегких бозонов темной материи [1], так и для решения прикладных задач навигационно-координатного обеспечения и других. Следующее поколение часов будет использовать для стабилизации непосредственно оптическую линию ядерного изомера. Ядра, будучи расположены в центре электронной оболочки, слабее по сравнению с атомными или молекулярными системами подвержены воздействиям внешних помех и внутрикристаллических полей. Эти линии достаточно узкие и устойчивые. Наиболее вероятным кандидатом является в настоящее время изомер ^{229}Th , возбужденное состояние которого $3/2^+[631]$ расположено на высоте $\omega_n = 8.338(24)$ эВ ([2]) над основным $5/2^+[633]$. В рамках данной работы атомы радиоактивных нуклидов с $A = 229$ внедрялись в кристаллические решетки CaF_2 , MgF_2 и др. В результате бета-распада образовывались ядра ^{229}Th , причем с повышенным по отношению к альфа-распаду ^{233}U изомерным отношением. Конверсионный канал распада подавлялся вследствие наличия запрещенной зоны с шириной, превышающей энергию изомера. Это позволило наблюдать фотоны от

ядерного распада и определить их энергию. Естественная ширина линии изомерного перехода составляет всего 10^{-5} Гц [3, 4], что удачно сочетается со временем когерентности лазерных установок. Тем не менее, правильное использование электронной оболочки играет решающую роль.

Пока, однако, отсутствует необходимое условие для конструирования стандарта частоты: энергия перехода неизвестна в пределах требуемой погрешности, которая определяется естественной шириной ядерной линии. Для ее определения подходит метод сканирования частоты лазера в поисках резонансного фотовозбуждения изомера. Тем не менее, и этот подход, чтобы иметь успех, должен быть построен на использовании резонансных свойств электронной оболочки [3]. Наиболее разработанный современный проект основан на применении частотной гребенки для поиска резонансной частоты в нейтральных атомах [5]. Метод использует уширение изомерной линии на 9 порядков величины вследствие внутренней конверсии, иначе поиск резонанса занял бы нереально много времени для практического воплощения.

Электронная оболочка предоставляет и возможность применения другого метода определения энергии изомера, рассматриваемого ниже. Сначала, однако, напомним кратко основы взаимодействия основного и изомерного уровней ядра через посредство электронной оболочки. С этой целью остановимся на результатах работы [6], в которой было показано ускорение распада изомера в водородоподобных ионах за счет смешивания основного и изомерного уровней ядра в состояниях атома с полным момен-

¹⁾e-mail: fkarpeshin@gmail.com

том $F = 2$. Когерентная суперпозиция их амплитуд вызывает осцилляцию во времени заселенностей основного и изомерного состояний ядра вокруг средних значений. Рассмотрим эти два вопроса по порядку.

В основном состоянии такой водородоподобной системы спины единственного электрона и ядра могут сложиться параллельно или антипараллельно. Соответствующий полный момент будет равен $F = 3$ или 2. Аналогично складываются спин электрона с изомерным ядром, образуя состояния с $F = 2$ или 1. Таким образом, состояние атома с $F = 2$ может быть двух типов: 1) ядро в основном состоянии, спины антипараллельны, и 2) ядро в изомерном состоянии, спины параллельны. А поскольку они взаимодействуют путем резонансной конверсии, то, согласно принципам квантовой механики, эти состояния образуют суперпозицию, которая и будет реальной волновой функцией. Обозначив амплитуды смешивания состояний атома двух типов α и β , соответственно, волновую функцию атома в основном и изомерном состояниях можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Psi_g &= \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle, \\ \Psi_{is} &= \alpha|2\rangle - \beta|1\rangle,\end{aligned}\quad (1)$$

где $\alpha \approx 1$, а β можно определить через матричный элемент взаимодействия и разность энергий двух состояний в первом порядке теории возмущений. Если атом в основном состоянии, то ядро тем не менее может быть с вероятностью $|\beta|^2$ в изомерном, а если атом в изомерном состоянии, то с той же вероятностью ядро у него может быть в основном. Это достигается за счет того, что основная и примесная амплитуды осциллируют во времени. Теперь на вопрос перехода атома из изомерного состояния в основное, например, радиационного можно взглянуть иначе: в какой-то момент времени ядро уже в основном состоянии, поэтому достаточно совершить спин-флип электрону, излучив избыток энергии. А поскольку ему это сделать на порядки легче, как отмечено во Введении, то время жизни изомера сокращается в сотни раз. На другое красивое следствие Варшавского эффекта смешивания ядерных уровней для гироманнитного отношения ядра ^{229}Th в основном состоянии было обращено внимание в работе [7].

Не менее заманчивым представляется использовать осцилляцию основного и изомерного уровней в основном состоянии атома. Например, представим, что мы внезапно отрываем электрон, взаимодействие с которым вызывает осцилляцию. Тогда очевидно, что ядро останется в том состоянии, в котором оно пребывало в момент отрыва. Это может быть как основное состояние, так и изомерное, причем отноше-

ние вероятностей прямо дается отношением квадратов амплитуд заселенности того и другого состояний. А вследствие закона сохранения энергии фотоэлектронов окажутся различающимися на разницу ядерных уровней, с точностью до изомерного сдвига. Мы таким образом можем определить энергию изомера, измерив разницу энергий между двумя линиями фотоэлектронов.

Теория эффектов, возникающих в ядерной физике вследствие внезапного возбуждения и ионизации атомов, была развита Фейнбергом [8] и независимо Мигдалом [9]. Проявление таких эффектов носит всеобщий характер в физике. Они наблюдаются в молекулярных, твердотельных системах, играя ключевую роль в экспериментах коллабораций LUX [10], XENON1T [11], DarkSide-50 [12], нацеленных на регистрацию взаимодействия частиц темной материи с веществом. Отдача ядра вследствие взаимодействия или изменение его заряда, согласно теории Фейнберга–Мигдала, сопровождаются ионизацией и возбуждением атомов, в процессе релаксации которых выделяется энергия, на регистрацию которой и ориентируются детекторы. В случае двойного безнейтринного e -захвата учет встряски приводит к его ускорению до порядка величины [13]. В двойном бета-распаде изменение заряда ядра на две единицы сопряжено с возбуждением дочернего атома не менее чем в 75 % случаев распада, причем энергия возбуждения составляет в среднем неожиданно большую величину: от 300 эВ до 1 кэВ [14]. Чтобы проиллюстрировать идею в нашем случае, рассмотрим фейнмановский график на рис. 1 в представлении Фарри

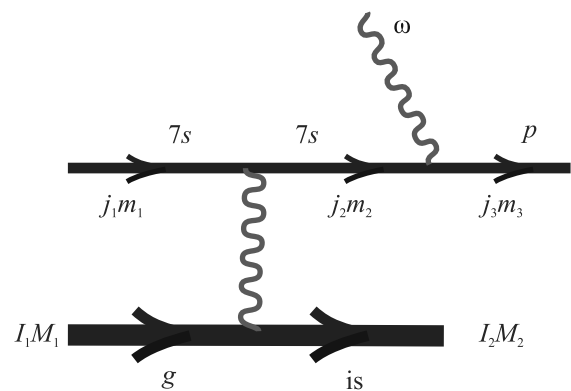


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентном $7s$ -электроне иона тория Th^+ с возбуждением изомера

для фотоэффекта на валентном $7s$ -электроне однократно ионизованного атома ^{229}Th . Ядро переходит в изомерное состояние в результате виртуального об-

мена фотоном с валентным электроном. Электрон же погружается на энергию ω_n ниже массовой поверхности. Затем он поглощает фотон из поля лазера и вылетает из атома. Удерживая в спектральном разложении в функции Грина электрона ближайшее 7s-состояние, амплитуду процесса можно записать в виде:

$$\begin{aligned}
 F_1 &= \sum_{j_2 m_2 M} \langle j_3 m_3 | H'_\gamma(\lambda, \mu) | j_2 m_2 \rangle \times \\
 &\times \frac{1}{-\omega_n} \langle I_2 M_2 j_2 m_2 | H'_c(LM) | I_1 M_1 j_1 m_1 \rangle = \\
 &= \sum_{j_2 m_2 M} \frac{C(j_2 m_2 \lambda \mu | j_3 m_3)}{\sqrt{2j_3 + 1}} \frac{\langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_2 \rangle}{\omega_n} \times \\
 &\times \frac{C(j_2 m_2 L M | j_1 m_1) C(I_1 M_1 L M | I_2 M_2)}{\sqrt{(2j_1 + 1)(2I_2 + 1)}} \times \\
 &\times \langle I_2 j_2 | H'_c(L) | I_1 j_1 \rangle. \quad (2)
 \end{aligned}$$

Здесь $j_1, m_1, j_2, m_2, I_1, M_1, I_2, M_2$ – угловые моменты и их проекции 7s-электрона и ядра, как показано на графике рис. 1. Соответствующие волновые функции нормированы на одну частицу в единице объема, как и сферическая волновая функция фотона с квантовыми числами $\lambda\mu$. j_3, m_3 – квантовые числа электрона в сплошном спектре. Его волновая функция, также в виде сферической волны, нормирована на δ -функцию по энергии. Для перехода к вероятности процесса рис. 1 квадрат амплитуды надо усреднить по начальным квантовым числам, просуммировать по конечным и результат умножить на 2π . Результат получим в виде:

$$\begin{aligned}
 W_1 &= \frac{2\pi}{(2\lambda + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)} \sum_{M_1 M_2 \mu m_1 j_3 m_3} |M_1|^2 = \\
 &= \sum_{j_3} \frac{2\pi |\langle I_2 j_2 | H'_c(L) | I_1 j_1 \rangle \langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_2 \rangle|^2}{(2\lambda + 1)(2L + 1)(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)\omega_n^2}. \quad (3)
 \end{aligned}$$

Поскольку в промежуточном состоянии мы ограничились 7s-уровнем, то в (3) существенны лишь слагаемые с $j_2 = j_3 = 1/2$. Вклад в амплитуду процесса от графика, аналогичного рис. 1, но с обратным порядком взаимодействия 7s-электрона с фотоном и ядром значительно меньше (например, ср. расчет графиков рис. 3а и с из работы [15]). Для получения сечения фотоэффекта из выражения (3) для вероятности ее надо разделить на поток падающих фотонов, равный с.

Фейнмановский график, отвечающий амплитуде обычного фотоэффекта, приведен на рис. 2. От со-

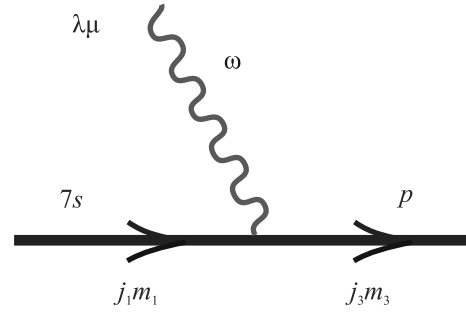


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентной 7s-оболочке однократно ионизованного атома тория

стояния ядра его амплитуда не зависит. Аналогично предыдущему, запишем для нее выражение в виде:

$$M_2 = \langle j_3 m_3 | H'_\gamma(\lambda, \mu) | j_1 m_1 \rangle, \quad (4)$$

и для вероятности в виде

$$W_2 = \frac{2\pi}{(2\lambda + 1)(2j_1 + 1)} \sum_{j_3} |\langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_1 \rangle|^2. \quad (5)$$

Приведенный конверсионный матричный элемент в (3) можно выразить через произведение коэффициента дискретной конверсии и радиационной ширины ядерного перехода (например, [16, 17])

$$\begin{aligned}
 |\langle I_2 j_2 | H'_c(1) | I_1 j_1 \rangle|^2 &= \\
 &= 3(2I_1 + 1)(2j_1 + 1) \alpha_d(M1; j_1 \rightarrow j_2) \Gamma_n^{(\gamma)}(I_1 \rightarrow I_2) / 2\pi. \quad (6)
 \end{aligned}$$

Как сказано выше, резонансная конверсия открывает возможность смешивания основного и изомерного ядерных состояний, несмотря на то, что у них разные спины, с сохранением полного углового момента атома F . Если в диаграмме рис. 1 рассмотреть водородоподобные ионы вместо однократных, то были бы возможны в начальном состоянии полные моменты $F = 2$ и 3 , причем уровень с $F = 2$ был бы основным. Аналогично, изомер мог бы образовывать с электроном состояния с $F = 1$ и 2 . Виртуальный переход в изомерное состояние возможен с $F = 2$, с начальным же состоянием с $F = 3$ процесс типа рис. 1 был бы невозможным. В рассматриваемом случае однократных ионов благодаря еще большему моменту электронной оболочки $j = 3/2$ тем более возможен целый ряд комбинаций для полного момента F как в начальном, так и в конечном состояниях. Правила отбора для дискретной конверсии автоматически учитывают эти комбинации в формулах для расчета дискретных КВК (коэффициентов внутренней кон-

версии) $\alpha_d(M1; 7s \rightarrow 7s)$. Разделив теперь почленно (3) на (5), заключим, что

$$W_1 = \beta^2 W_2, \quad \beta^2 = \frac{\alpha_d(M1; j_2 \rightarrow j_1) \Gamma_n^{(\gamma)}(I_1 \rightarrow I_2)/2\pi}{\omega_n^2}. \quad (7)$$

Выражение (7) представляет собой не что иное, как формулу для вероятности смешивания ядерных состояний в (1) в первом порядке теории возмущений, в полном согласии с высказанным ранее ожиданием пропорциональности заселения уровней квадратам соответствующих амплитуд в (1).

Тот же эффект смешивания ядерных уровней возникает и в нейтральных атомах тория. Фейнмановская диаграмма возбуждения изомера при ионизации $7s$ -электрона показана на рис. 3. Падающий фо-

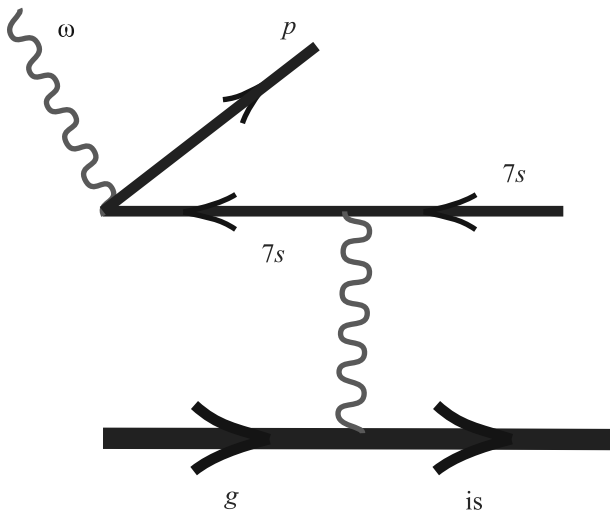


Рис. 3. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентной $7s$ -оболочке нейтрального атома тория с возбуждением изомера

тон выбивает один из $7s$ -электронов, образуя дырку в оболочке с избытком энергии над массовой поверхностью на величину ω_n . При взаимодействии дырки с ядром эта энергия передается ядру, переводя его в изомерное состояние. Расчет этой диаграммы вполне аналогичен приведенному выше и приводит к тому же результату (7). Спектр выбитых фотоном электронов так же будет состоять из двух линий, разделенных на величину энергии изомера ω_n .

Последний пример наводит на мысль, что и образование дырки во внутренних оболочках так же приведет к заселению изомера по механизму встряхивания атома. Разница появляется в том, что ширина дырочного состояния на внутренних оболочках достигает ощутимой величины: 88.2, 14.3 и 15.5 эВ на K -, L_1 - и M_1 -оболочках [18]. Наличие ширины в

конечном состоянии проявится появлением такой же ширины и в линиях фотоэлектронов вследствие закона сохранения энергии. Математически это выражается добавлением резонансного фактора Брейта-Вигнера в формуле (3) для спектра электронов:

$$\frac{dW_1}{dE} = \sum_{j_3} \frac{2\pi |\langle I_2 j_2 || H'_c(L) || I_1 j_1 \rangle \langle j_3 || H'_\gamma(\lambda) || j_2 \rangle|^2}{(2\lambda + 1)(2L + 1)(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)\omega_n^2} \times \frac{\Gamma/2\pi}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (8)$$

где Γ — полная ширина дырки, E , E_0 — кинетическая энергия выбитых электронов и ее резонансное значение.

После интегрирования по профилю электронной линии при условии, что $E_0 \gg \Gamma$, для вероятности возбуждения изомера получим то же выражение (3), и (7) — для отношения ветвления.

Коэффициенты дискретной конверсии были вычислены, например, в работах [4, 15]. Для энергии изомера 8.338 эВ $\alpha_d(M1; 7s \rightarrow 7s) = 3.90 \times 10^{10}$ эВ, $\alpha_d(M1; 1s \rightarrow 1s) = 5.14 \times 10^{18}$ эВ, $\alpha_d(M1; 2s \rightarrow 2s) = 1.77 \times 10^{17}$ эВ, и $\alpha_d(M1; 3s \rightarrow 3s) = 7.84 \times 10^{15}$ эВ для нейтральных атомов, соответственно. По формуле (7) найдем вероятность образования изомера $\beta^2 = 5.24 \times 10^{-4}$, 1.80×10^{-5} , 8.00×10^{-7} и 3.98×10^{-12} для $1s$ -, $2s$ -, $3s$ - и $7s$ -состояний, соответственно. Результаты расчета представлены в табл. 1.

Наши результаты для $1s$ -электронов согласуются с полученными ранее в работах [6, 15]. Если положить энергию изомера в формуле (7) $\omega_n = 3.5$ эВ и учесть, что $\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns) \sim \omega_n^{-3}$, то получилось бы $\beta^2 = 0.02$, что совпадает с использованным в [6] значением. Аналогичное согласие имеет место с работой [15]. Для $2s$ -электронов дискретный КВК и, соответственно, вероятность возбуждения на порядок меньше. Этого следовало ожидать, поскольку в первом приближении коэффициенты пропорциональны электронной плотности в начале координат. Убывание усиливается и вследствие экранирования. Для следующих орбит эффект убывает по тому же закону. Таким образом, эффект возбуждения изомера при встряске атома максимален для K -электронов, а с повышением номера оболочки он уменьшается. С другой стороны, ширина профиля электронной линии равна ширине дырки. Поэтому разрешить экспериментально две линии по энергии легче в случае образования дырки на более высоких оболочках. Следовательно, при выборе методики эксперимента надо исходить из конкретных условий, целей и задач.

Таблица 1. Значения дискретных КВК $\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns)$, вероятностей образования изомера β^2 и полных ширин дырочных состояний Γ

	1s	2s	3s	7s
$\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns)$, эВ	5.14×10^{18}	1.77×10^{17}	7.84×10^{15}	1.95×10^{10}
β^2	5.24×10^{-4}	1.80×10^{-5}	8.00×10^{-7}	3.98×10^{-12}
Γ , эВ [18]	88.2	14.3	15.5	—

Подводя итог, резюмируем, что лавинообразное возрастание числа экспериментальных работ, в которых последовательно уточняется энергия изомера (например, [2, 19] и ссылки там), а также новых проектов [20, 21] говорит о том, что основная на сегодняшний день задача изучения ^{229m}Th – определения его энергии – входит в решающую фазу. На этом фоне предложенный выше способ измерения энергии изомера в случае его осуществления способен значительно уменьшить неопределенность измерения. Независимо от того, в какой оболочке наблюдается фотоэффект, в спектре фотоэлектронов предсказываются парные линии, разделенные на энергию изомера. Разумеется, возбуждение изомера при внезапном образовании дырки в оболочке представляет интерес и само по себе. Уместно заметить, что вероятность образования изомера пропорциональна парциальной ширине его радиационного распада. Поэтому изучение эффекта в эксперименте поможет уточнить ее значение.

Помимо фотоэффекта, внезапная ионизация может быть произведена электронным ударом и другими методами. В работе [15] рассмотрена ионизация при прохождении пучков тяжелых ионов сквозь легкие (бериллиевые) мишени. Такая методика как раз отработана на накопительных кольцах в ГСИ Дармштадт, ИСФ Ланьчжоу. Она является обычным инструментом для формирования радиоактивных пучков тяжелых ионов. Более того, по приведенной выше схеме фотоэффект может быть использован и в различных комбинациях с другими методами, например, в опытах с кристаллической решеткой типа описанных в работе [2].

Автор хотел бы выразить признательность Я. Жиличу и М. Пфюцнеру за иницирующие обсуждения.

1. M. Filzinger, S. Dörscher, R. Lange, J. Klose, M. Steinell, E. Benkler, E. Peik, C. Lisdat, and N. Huntemann, Phys. Rev. Lett. **130**, 253001 (2023).
2. S. Kraemer, J. Moens, M. Athanasakis-Kaklamanakis et al. (Collaboration), Nature **617**, 706 (2023); <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05894-z>.
3. Л. Ф. Витушкин, Ф. Ф. Карпешин, М. Б. Тржасковская, ЯФ **83**, 463 (2020) [L. F. Vitushkin,

- F. F. Karpeshin, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. At. Nucl. **83**, 775 (2020)].
4. F. F. Karpeshin and L. F. Vitushkin, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.08711>.
5. L. von der Wense and Z. Chuankun, Eur. Phys. J. Ser. D **74**, 146 (2020).
6. F. F. Karpeshin, S. Wycech, I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, M. Pfützner, and J. Zylicz, Phys. Rev. C **57**, 3085 (1998).
7. V. M. Shabaev, D. A. Glazov, A. M. Ryzhkov, C. Brandau, G. Plunien, W. Quint, A. M. Volchkova, and D. V. Zinenko, Phys. Rev. Lett. **128**, 043001 (2022).
8. E. L. Feinberg, J. Phys. (USSR) **4**, 423 (1941).
9. А. Мигдал, ЖЭТФ **11**, 207 (1941).
10. D. S. Akerib, S. Alsum, H. M. Araújo et al. (LUX Collaboration), Phys. Rev. Lett. **122**, 131301 (2019).
11. E. Aprile, J. Aalbers, F. Agostini et al. (XENON Collaboration), Phys. Rev. Lett. **123**, 241803 (2019).
12. P. Agnes, I. F. M. Albuquerque, T. Alexander et al. (DarkSide Collaboration), Phys. Rev. Lett. **130**, 101001 (2023).
13. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **107**, 045502 (2023).
14. М. И. Криворученко, К. С. Тырин, Ф. Ф. Карпешин, Письма в ЖЭТФ **117**, 887 (2023).
15. F. F. Karpeshin, I. M. Band, and M. B. Trzhaskovskaya, Nucl. Phys. A **654**, 579 (1999).
16. Б. А. Зон, Ф. Ф. Карпешин, ЖЭТФ **97**, 401 (1990) [B. A. Zon and F. F. Karpeshin, Sov. Phys. – JETP **70**, 224 (1990)].
17. Ф. Ф. Карпешин, Мгновенное деление в моонных атомах и резонансная конверсия, Наука, СПб. (2006).
18. J. L. Campbell and T. Papp, At. Data Nucl. Data Tables **77**, 1 (2001).
19. L. von der Wense and B. Seiferle, Eur. Phys. J. A **56**, 277 (2020).
20. Scientific Program and Abstracts of Int. Workshop on “100 years of Nuclear Isomers”, 2–4 May 2022, Berlin, Germany.
21. Scientific Program and Abstracts of 766-th WE-Heraeus-Seminar on “High-Precision Measurements and Searches for New Physics”, 9–13 May 2022, Physikzentrum Bad Honnef, Germany, <https://www.we-heraeus-stiftung.de/veranstaltungen/high-precision-measurements-and-searches-for-new-physics/>.

GRB 221009A, его предшественник и два послесвечения в данных Ферми

Б. Штерн⁺¹⁾, И. Ткачев^{+*}

⁺Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

*Физический факультет и Лаборатория космологии и физики элементарных частиц, Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 24 августа 2023 г.

После переработки 20 сентября 2023 г.

Принята к публикации 21 сентября 2023 г.

Мы исследуем GRB 221009A, самый яркий гамма-всплеск в истории наблюдений, с использованием данных Ферми. Чтобы откалибровать данные для больших углов наклона, мы используем гамма-источник Vela X. Кривые блеска в различных спектральных диапазонах демонстрируют 300-секундное перекрытие послесвечения и запоздавших мягких эпизодов прямой стадии всплеска. Мы показываем, что относительно слабый предшественник (прекурсор) вспышки, происходящий за 3 мин до основного эпизода, имеет свое собственное послесвечение, т.е. предположительно, свой собственный внешний шок. Это первое наблюдение такого явления, которое исключает некоторые теоретические модели прекурсоров гамма-всплесков. Основное послесвечение является самым ярким и включает фотон с энергией 400 ГэВ через 9 ч после всплеска, мы показываем, что эмиссия прослеживается в данных LAT в течение двух суток.

DOI: 10.31857/S123456782320003X, EDN: орупуо

Введение. Недавний и самый яркий гамма-всплеск GRB 221009A был обнаружен многими космическими рентгеновскими и гамма-обсерваториями, включая Fermi [1, 2], Swift (для более детального анализа см. [3]), SRG/ART-XC [4], Konus-Wind [5] и другие.

Всплеск и его послесвечение также были зарегистрированы LHAASO на Земле в диапазоне от сотен гигаэлектронвольт до нескольких тераэлектронвольт [6]. Система детекторов Carpet-2 на Баксанской нейтринной обсерватории обнаружила атмосферный ливень фотонов с энергией 250 ТэВ из места вспышки GRB 221009A [7]. С другой стороны, сотрудничество HAWC сообщает о недетектировании фотонов из послесвечения в диапазоне тераэлектронвольт более чем через 8 ч после срабатывания [8] и дает верхний предел на поток энергии $4.16 \cdot 10^{-12}$ ТэВ см⁻² с⁻¹.

Вспышка была собственно яркой и относительно близкой, $z = 0.151$. Видимая яркость GRB 221009A является исключительной. В каталоге вспышек Fermi GBM она превышает следующую по потоку энергии в 15 раз. Однако наибольший интерес к этому событию связан с утверждениями о двух фотонах с энергией 18 ГэВ (LHAASO) и 250 ТэВ (Carpet 2), которые не могут происходить от $z = 0.15$

из-за поглощения на межгалактическом световом фоне. Для объяснения этих фотонов в ряде работ привлекалась новая физика: см., например, [9–12] and [13] (последняя работа также содержит всеобъемлющий список работ по данной теме). Изучение спектров GRB 221009A также может использоваться для установления ограничений на силу межгалактического магнитного поля [14].

В настоящей работе, опираясь на рекордную яркость GRB 221009A, мы пытаемся найти что-то новое о самих гамма-всплесках в общедоступных данных Fermi. А именно:

- Есть ли что-то интересное между прекурсором всплеска и его основным излучением через три минуты.
- Как выглядит переход от прямой фазы гамма-всплесков к послесвечению?
- Насколько яркое послесвечение и насколько долго его можно проследить в диапазоне гигаэлектронвольт.

Данные и их калибровка. На рисунке 1 показаны некоторые сырые данные Fermi для GRB 221009A. Большой телескоп с большой площадью (LAT) и детекторы NaI гамма-излучения монитора вспышек (GBM) были перенасыщены, в то время как сцинтилляционные детекторы из германата висмута (BGO) удовлетворительно воспроизводят пико-

¹⁾e-mail: stern@inr.ru

вый поток в энергетических каналах выше ~ 1 МэВ. В наиболее интересных интервалах 220–240 и 260–270 с отсутствуют данные LAT, причем не только с направления всплеска, а со всего неба.

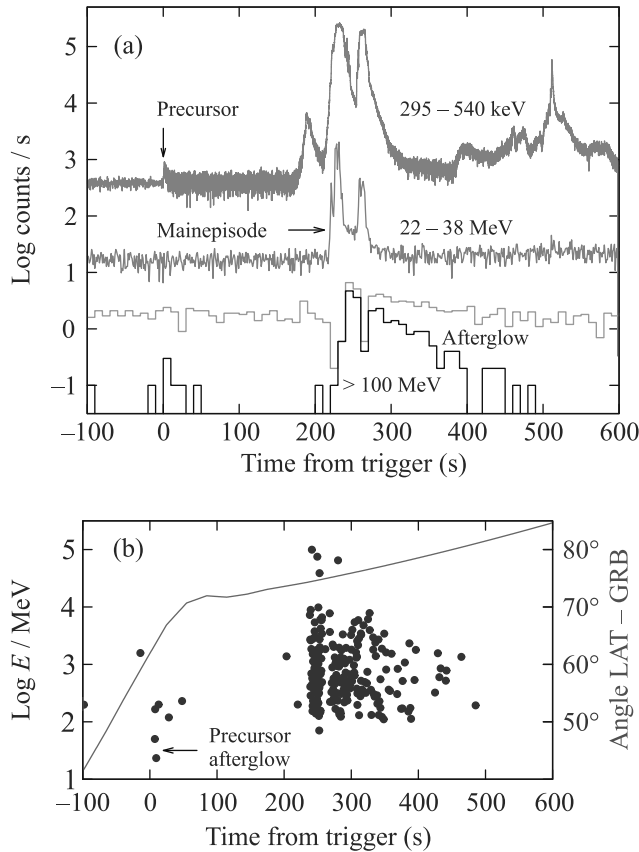


Рис. 1. (Цветной онлайн) Временная эволюция GRB 221009A в необработанных данных. Фаза предшественника и раннее послесвечение. (a) – Число событий в различных энергетических диапазонах в логарифмической шкале, верхняя кривая GBM NaI 295–540 кэВ, средняя кривая GBM BGO 22–38 МэВ, нижняя синяя кривая LAT, 8° круг вокруг местоположения GRB 221009A, желтая кривая – все фотоны LAT. Падения на 210 и 260 секундах вызваны перенасыщением детектора. (b) – Отдельные фотоны LAT в 8° круге вокруг положения GRB 221009A (левая логарифмическая шкала энергии) и угол между осью LAT и направлением вспышки (правая шкала). Обратите внимание на излучение в диапазоне 10–200 МэВ через 50 с после предшественника

Следующим обстоятельством, которое затрудняет прямую интерпретацию данных LAT, является большой угол θ между направлением оси z LAT и местоположением вспышки. Вспышка произошла на самом краю поля зрения телескопа, где эффективность обнаружения низкая. На рисунке 1b показана зависимость времени от θ во время события. Угол

наклона менялся от 75° до более 80° при $t \sim 500$ с, когда источник покинул поле зрения на час.

Зависимость угла от эффективной площади LAT приведена в [15], см. также Fermi LAT Performance. Однако эти данные имеют недостаточное разрешение для данной конкретной задачи, поэтому мы провели подробную калибровку эффективности обнаружения LAT для больших углов падения с использованием самого яркого источника гамма-излучения Vela X (как пульсара, так и туманности). Тот же объект использовался командой Fermi для калибровки функции распределения точечного источника [15].

Мы используем фотоны в окружности радиусом 8° вокруг положения Vela X в качестве калибровочной выборки. Выбор радиуса поля зрения является результатом компромисса между достаточным сбором фотонов с энергией около 100 МэВ ($> 68\%$) и загрязнением выборки фоновыми фотонами. Результаты нашей калибровки показаны на рис. 2.

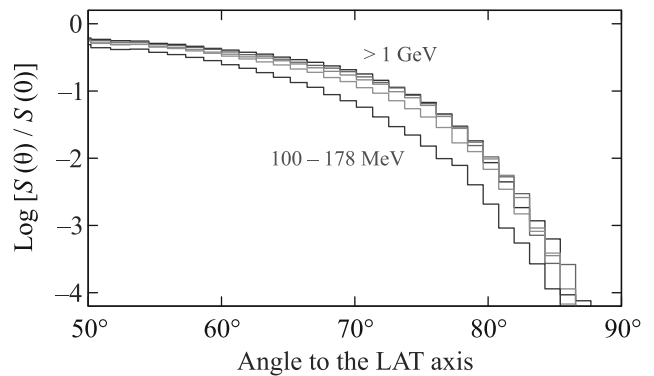


Рис. 2. (Цветной онлайн) Калибровочные данные для эффективности LAT при больших углах падения с использованием гамма-пульсара Vela-X. Показано отношение эффективной площади к эффективной площади на оси в зависимости от угла между источником фотонов и осью z LAT. Кривые сверху вниз соответствуют энергетическим интервалам: > 1 ГэВ, 1 ГэВ–562 МэВ, 562 МэВ–316 МэВ, 316 МэВ–178 МэВ, 178 МэВ–100 МэВ

Количество фотонов в нашей калибровочной выборке составляет $9.4 \cdot 10^6$, тогда как количество фоновых фотонов составляет около $2 \cdot 10^6$, как мы оценили из соседней области Млечного Пути. Таким образом, фон значителен, но его влияние должно быть умеренным, поскольку угловое рассеяние фоновых фотонов вносит вклад в эффективность обнаружения с разными знаками: количество фотонов, падающих под углом $\theta + \Delta$, сравнимо с количеством фотонов, пришедших под углом $\theta - \Delta$. Тем не менее, широкое угловое обрезание в калибровочной выборке имитирует некоторое расширение поля зрения. Мы проверили влияние углового обрезания с помощью той

же калибровки, обрезав выборку на 4° . Разница при $\theta = 78^\circ$ для фотонов с $E \gtrsim 1$ ГэВ составляет около 40 %, а для интервала 100–178 МэВ – примерно в 2.5 раза больше. Последнее большое значение, конечно, является эффектом расширения функции разброса точечного источника на краю поля зрения. Поэтому мы предпочитаем использовать калибровку с выборкой шириной 8° , так как она лучше воспроизводит мягкую часть спектра, а дополнительный фон лишь слегка влияет на его жесткую часть.

Кроме угловой зависимости эффективности регистрации, следует учитывать энергетическую зависимость. Мы используем описание, приведенное в [15]. Обратите внимание, что для самого низкого энергетического интервала 100–178 МэВ, для которого мы используем эффективность в 0.45 от максимальной эффективности. Таким образом, фотон с энергией 100 МэВ, обнаруженный LAT через 400 с после срабатывания, представляет собой примерно 300 фотонов той же энергии, пересекающих площадь детектора (см. рис. 1b и 2). В нашем анализе и калибровке мы не различаем тип преобразования и класс качества фотонов, используя общую эффективную площадь для класса “транзиентное” событие.

Основной эпизод и начало послесвечения. Нормированные данные Fermi для первых 600 секунд показаны на рис. 3. Данные LAT были нормированы с использованием наших результатов калибровки Vela X (рис. 2) и энергетической зависимости эффективной площади из [15]. Общая эффективная площадь двух детекторов BGO была установлена на уровне 200 cm^2 независимо от энергии и угла падения, так как такое предположение достаточно для качественной демонстрации. Для энергетической и угловой характеристики детекторов BGO см. [16].

Поток энергии в диапазоне BGO 22–38 МэВ в интервале 300–600 с очень чувствителен к модели фона. Мы используем трехпараметрическое описание: постоянную компоненту плюс синусоиду с полупериодом, соответствующим интервалам подгонки 300–150 с и 600–1300 с. Полученное значение χ^2 хорошее, однако ошибка в потоке энергии в BGO велика, поэтому мы не учитываем данные BGO при восстановлении спектров фотонов. Мы наблюдаем поразительное изменение временного поведения при ~ 300 с: резкое снижение основного импульса переходит в плоский плавный наклон. Исключением является другой мягкий эпизод прямой эмиссии в интервале 400–600 с, который мы обсудим ниже. Было бы разумно предположить, что высокоэнергетическое излучение после 300 с можно рассматривать как послесвечение основного всплеска.

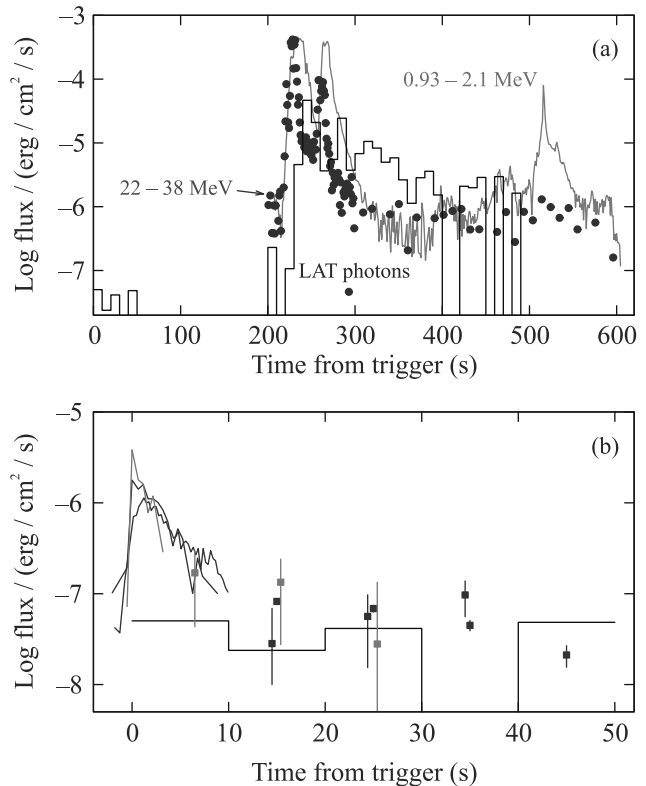


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Прямая эмиссия GRB 231009A и раннее послесвечение в различных энергетических диапазонах. Гистограмма: поток энергии фотонов LAT, нормированный на зависимость от угла эффективную площадь, откалиброванную с помощью источника Vela-X. Розовая линия: поток энергии в диапазоне 0.93–2.1 МэВ от детекторов Gamma-Burst Monitor BGO. Синие кружки: то же самое в диапазоне энергии 22–38 МэВ. (б) – Нижний левый угол панели (а) с дополнительными данными. Пурпурный: сумма 5 самых ярких детекторов NaI в диапазоне 0.1–0.3 МэВ с предположением эффективной площади 400 cm^2 . Синий: детекторы BGO в диапазоне 0.38–0.93 МэВ с предположением эффективной площади 200 cm^2 . Розовый: BGO, диапазон 0.93–2.1 МэВ. Черный: распределение потока энергии, представленное 6 фотонами LAT от 20 до 230 МэВ

Феноменологически, излучение прямой стадии гамма-всплеска обычно характеризуется очень быстрыми изменениями интенсивности и спектра, в то время как послесвечение имеет плавное длительное снижение с устойчивым широким энергетическим спектром. Прямое излучение иногда состоит из нескольких импульсов различной длительности и спектра, эти импульсы могут перекрываться во времени, порождая в некоторых случаях сложные структуры с широким временным спектром мощности Фурье [17]. Их временное поведение очень разнообразно. Напротив, все послесвечения имеют типич-

ное временное поведение: степенное убывание немного быстрее, чем t^{-1} .

Существует парадигма, согласно которой прямое излучение возникает из-за внутренних ударных волн (или магнитного пересоединения или обоих эффектов) в джете, в то время как послесвечение возникает из-за внешней ударной волны при столкновении джета с окружающей средой (см., например, [18]), главным образом, с звездным ветром прародителя GRB [19]. Физически прямое излучение во многих случаях может быть описано как излучение оптически толстой среды из-за многократной комптонизации (например, [20]), в то время как послесвечение лучше соответствует синхротронному/комптоновскому излучению электронов, ускоряемых в оптически тонкой среде, см. [21] для обзора.

В случае GRB 221009A мы можем отнести к прямому излучению предшественника, мягкий импульс при $t \sim 180\text{--}200$ с, два основных жестких импульса и мягкую длинную структуру в интервале $400\text{--}600$ с. Поток фотонов, обнаруженных LAT с момента 250 с и его спектр (см. рис. 4) и кривая блеска больше соответствуют послесвечению, а не прямому излучению. Структура при $400\text{--}600$ с, вероятно, представляет собой независимый эпизод прямого излучения, перекрывающийся во времени с ранним послесвечением.

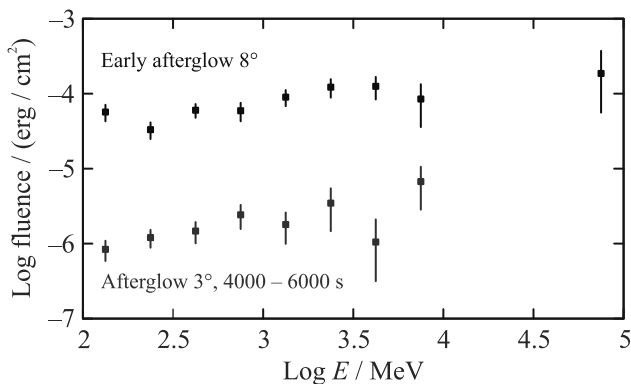


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектральное энергетическое распределение фотонов, обнаруженных методом LAT на временных интервалах $280\text{--}500$ с и $4000\text{--}6000$ с, восстановленное с калиброванной эффективной площадью (см. рис. 2)

Вероятно, механизм послесвечения (предположительно, внешняя ударная волна) включился немного раньше, например, при 230 с. Поэтому мы используем это время как точку отсчета для спада послесвечения по степенному закону.

Наша оценка энергетического потока, представленного 229 фотонами, зарегистрированными LAT в интервале времени $220\text{--}500$ с, составляет

$1.55 \cdot 10^{-3}$ эрг/см². Фактический поток энергии может быть несколько выше, так как мы не знаем, сколько фотонов теряется в промежутках, потерянных из-за насыщения. Предварительная нижняя оценка энергетического потока, проведенная в [2], составляет 2.9×10^{-2} эрг/см², общий энергетический поток может быть значительно выше, см. [22].

Спектральное распределение энергии в диапазоне от 100 МэВ до 100 ГэВ показано на рис. 4. Мы провели фитирование методом прямой подгонки спектральной гипотезы к количеству зарегистрированных фотонов в энергетических бинах. Мы использовали метод максимального правдоподобия с учетом статистики Пуассона, учитывая энергетическую и угловую зависимость эффективной площади детектора. Мы факторизуем фронтальную эффективную площадь (используя параметризацию PR8_TRANSIENT020_V3) и учитываем θ -зависимость, показанную на рис. 2. Полученный спектральный индекс для фотонов LAT в поле с углом обзора 8° (где фон для короткого временного интервала практически отсутствует) составляет -1.66 ± 0.07 , что является более жестким, чем оценка [23].

Основное послесвечение. Через 500 с после срабатывания источник гамма-всплеска вышел из поля зрения LAT. Следующее временное окно было открыто примерно с 4100 до 5700 с. Затем местоположение GRB221009 периодически появлялось в поле зрения с общим временем видимости около 20 %.

На рисунке 5 показано количество обнаруженных фотонов LAT в зависимости от логарифма времени. В отличие от основного эпизода, который практически не имеет фона, фон во время позднего послесвечения значителен и становится слишком большим в поле зрения 8° , которое мы приняли для описания основного эпизода. По этой причине мы анализируем послесвечение, используя круг диаметром 1° .

Фон, оцененный с использованием фотонов, обнаруженных из того же направления в течение 300 000 с до тиггера, показан на рис. 5. С использованием данного окна, послесвечение остается значимым до двух суток (см. рис. 5b). Дальнейшее сокращение поля зрения не улучшает значимость. На рисунке 5a показаны фотоны LAT в логарифмической шкале времени для поля зрения 1° . Кажется, что послесвечение становится мягче со временем, однако стоит обратить внимание на фотон с энергией 400 ГэВ при $\log(t) \sim 4.5$ (33554 с). Угловое отклонение этого фотона от местоположения GRB составляет 0.06° , вероятность случайного совпадения с таким угловым отклонением в течение суток составляет $\sim 10^{-6}$. Этот

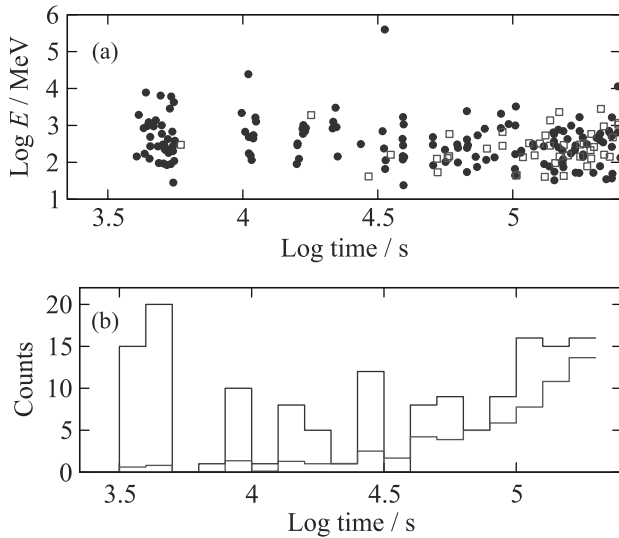


Рис. 5. (Цветной онлайн) Независимая от реакции демонстрация соотношения сигнал/фон. События в круге 1° вокруг GRB 221009A, обнаруженные LAT. (a) – Фотоны в интервале времени 10^3 – $3 \cdot 10^5$ с момента триггера (пурпурные точки) и фоновые фотоны в интервале той же длины, но до триггера (красные квадраты). (b) – То же, но в виде гистограммы. Оценка фона была сделана с использованием поля 8° вокруг местоположения гамма-всплеска за 300000 с до всплеска

фотон отсутствует в телеграмме команды Fermi, но был замечен [24]. Впечатление о смягчении спектра может быть обусловлено отсутствием мягких фотонов в основном эпизоде и их избытком при $t \sim 10^5$ с. Первое может быть объяснено более сильным подавлением мягких фотонов при больших углах падения (см. рис. 2), а второе – вкладом более мягкого фона. Статистика недостаточна для выявления эволюции спектра послесвечения.

Спектральные энергетические распределения для начала послесвечения и для второго окна показаны на рис. 4. Они согласуются друг с другом и незначительно отличаются от “канонического” спектра с плоской формой (фотонный индекс $\alpha = -2$). Мы зафиксировали фотонный индекс равным -2 при аппроксимации энергетического потока послесвечения. Рисунок 6 показывает поток фотонов послесвечения в зависимости от времени.

Мы нормируем поток, учитывая долю фотонов точечного источника в поле зрения 1° , которая зависит от энергии фотона и ориентации космического аппарата. Здесь мы опираемся на функцию отклика Fermi, используя версию PSF для “транзиентного” класса. Для сравнения мы добавили некоторые точки для других ярких всплесков: GRB 130427SA, [25], GRB 180720B [26], GRB 190114C [27] и GRB

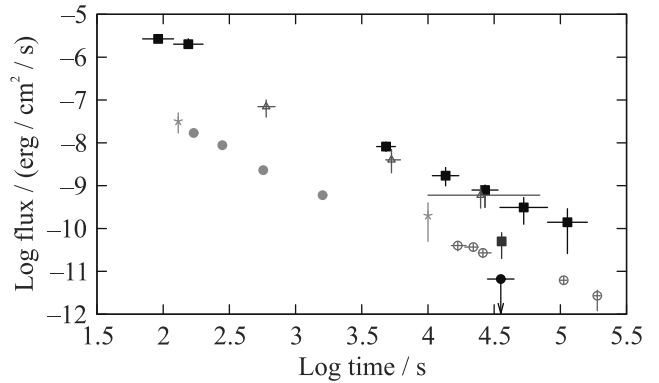


Рис. 6. (Цветной онлайн) Послесвечение нескольких гамма-всплесков. Черный цвет: GRB221009A, квадраты с погрешностями – настоящая работа, точка с верхним пределом – коллаборация HAWC. Синий цвет: GRB 190114C, точки – MAGIC (0.3–1 ТэВ), звездочки с погрешностями – Fermi LAT. Зеленый цвет: GRB 190829A – H.E.S.S. (0.2–4 ТэВ). Фиолетовый цвет: GRB 180720B – H.E.S.S. (100–440 ГэВ). Красный цвет: GRB 130427A – Fermi LAT

190829 [28]. Эти данные были суммированы и обсуждены в работе [29]. Послесвечение GRB немного ярче послесвечения GRB 130427A и почти в десять раз ярче GRB 180720B, 190114C и 190829, которые были обнаружены черенковскими телескопами. Это первый случай, когда послесвечение все еще видно в диапазоне Fermi два дня после гамма-всплеска (второе яркое послесвечение GRB 130427SA видно в данных Fermi LAT до полудня). Интригующим образом, оно не было обнаружено сотрудничеством HAWC [8], см. рис. 6. Послесвечение по-прежнему значимо на уровне 3σ : в интервале 100000–200000 с количество фотонов составляет 40 по сравнению с ожидаемыми 24.4 фотонами, измеренными в “зеркальном” интервале от -100000 до -200000 с. Кривая блеска послесвечения в диапазоне 0.1–10 ГэВ может быть описана степенным законом $F \sim t^{-\alpha_\tau}$, где $\alpha_\tau = 1.47 \pm 0.05$ или 1.36 ± 0.05 , если мы исключим первую точку данных, так как она может быть смещена неопределенностью времени начала послесвечения (для которого мы установили 230 с после срабатывания). Это затухание немного медленнее, чем то, что измерено LHAASO [6] в интервале $20 < t < 1000$ с в диапазоне энергий выше 0.2 ТэВ ($\alpha_\tau = 2.21 + 0.30 - 0.83$). Энергетический поток послесвечения в диапазоне 0.1–10 ГэВ составляет $3.6 \cdot 10^{-4}$ эрг см $^{-2}$.

Результаты коллаборации “Ферми” по регистрации гама-квантов телескопом LAT GRB 221009 все еще не опубликованы. Однако послесвечение было проанализировано другими группами на основе пуб-

лично доступных данных LAT. В частности, в работе [30] дается несколько более высокая оценка потока, чем наша, хотя разница укладывается в одно стандартное отклонение. Точки из работы [31] для времени 3000 с также совпадают с нашими результатами в пределах ошибок. Обе группы дают только верхние пределы для времени после 68000 с в то время, как мы видим 3σ сигнал после первого дня с момента события.

Послесвечение прекурсора. Fermi LAT обнаружил 6 фотонов в диапазоне от 20 до 230 МэВ в интервале времени от 7 до 50 с после триггера (рис. 1b), когда угол θ менялся от 65° до 70° , а эффективная площадь детектора LAT была несколько раз меньше, чем для фотонов, падающих по оси детектора (см. рис. 2). Следует отметить, что промгновое предшественниковое излучение уже рассеялось, когда LAT обнаружил первые из этих фотонов. Мы оцениваем энергетический поток, представленный этими 6 фотонами, как $1.5 \cdot 10^{-6}$

На рисунке 3b показана кривая блеска с детекторов GBM в канале 0.1–0.29 МэВ (детекторы NaI) и в диапазоне 0.38–2.12 МэВ (детекторы BGO), а также вклад 6 фотонов LAT-GRB, представленный в виде гистограммы. Сам прекурсор выглядит как типичный импульс с быстрым нарастанием – экспоненциальным затуханием (FRED), который обычно составляет прямое излучение гамма-всплесков. Он затухает быстрее при более высоких энергиях, что также является типичной особенностью FRED. Через несколько секунд импульс FRED переходит в плоский хвост излучения широкого спектра, похожий на типичное послесвечение гамма-всплеска. Мы предполагаем, что здесь происходит то же явление: прекурсор переходит в послесвечение прекурсора.

Насколько значимо это “пре-послесвечение”? Оно высоко значимо в диапазоне 0.1–0.29 МэВ до 50 с, маргинально значимо в диапазоне 0.38–2.12 МэВ до 40 с. В более высоких энергетических диапазонах GBM мы получаем только верхние пределы, не превышающие 10^{-7} эрг/см²/с. Однако лучший маркер прослесвечения – это эмиссия высокой энергии, предположительно, происходящая от внешней ударной волны. Мы подсчитали фотоны из круга с углом 8° , когда ориентация оси LAT к гамма-всплеску была $63^\circ < \theta < 71^\circ$ в течение 30000 с до вспышки. Результат – 302 фотона за 23400 с, что дает ожидание 0.64 фотона для интервала 50 с после прекурсора. Вероятность получить 6 фотонов случайно составляет $0.5 \cdot 10^{-4}$ (4σ). Следует отметить, что в данном случае нет “эффекта поиска в других местах”: фотоны появляются в правильном месте без манипуляции с

выборкой. Поэтому эта значимость вполне достаточна для того, чтобы утверждать, что Fermi обнаружил прослесвечение прекурсора. Это первый случай такого обнаружения. Идея, что прекурсор GRB может вызывать свое собственное послесвечение, была предложена в [32]. Спектральная подгонка к 6 фотонам, конечно, достаточно грубая, получившийся спектральный индекс составляет $\alpha = -2.5 \pm 0.5$, что согласуется со спектром основного послесвечения с $\alpha \sim -2$. Более того, если эмиссия в диапазоне 10–50 с в диапазоне сотен кэВ является частью единого широкого спектра, то энергетическое распределение спектра очень близко к плоскому (т.е. $\alpha \sim -2$).

Обсуждение и выводы. Вероятно, самый интересный факт, который мы видим в данных Fermi, – это послесвечение прекурсора. Это первое прямое доказательство такого явления, по крайней мере, если мы рассматриваем прекурсор как относительно слабое событие, отделенное от основного эпизода длительным временным интервалом. Слабый прекурсор, который происходит задолго до (до нескольких минут) основного гамма-всплеска, является особенностью многих событий. Оценки их возникновения варьируются от 3 % GRB [33] до 10 % [34] или даже 20% [35]. Полезный обзор явления представлен в работе [36]. Фактически, эта доля может быть еще выше, так как прекурсор может быть легко потерян. Прекурсор GRB 221009A имеет в несколько сотен раз более низкий пиковый поток фотонов и в несколько тысяч раз более низкое энергетическое выделение, чем основной эпизод излучения. Такой относительно слабый прекурсор может быть обнаружен только в редких случаях очень сильных всплесков, и нельзя исключать, что это явление типично для большинства событий, и мы наблюдаем только самые сильные прекурсоры. Однако этот слабый прекурсор имеет яркое послесвечение. Поток энергии прекурсора и его послесвечения составляет: $\sim 1.7 \cdot 10^{-5}$ эрг/см² (0.1–4.8 МэВ, BGO) и $\sim 1.5 \cdot 10^{-6}$ эрг/см² в диапазоне 23–230 МэВ соответственно. Кроме того, оценка [37] потока прекурсора составляет $2.38 \pm 0.04 \cdot 10^{-5}$ эрг/см². Следовательно, их соотношение составляет примерно 10^{-1} , в то время как то же самое соотношение для основного события составляет менее 10^{-2} (или 10^{-3} , если использовать оценку 0.21 эрг/см² для основного эпизода быстрого излучения в диапазоне 0.02–10 МэВ [22]). Это намек на то, что прекурсор может отличаться от основного GRB по своей природе. Если мы следуем парадигме, что быстрое излучение происходит от внутренних ударных волн в джете, а послесвечение происходит от внешнего удара в окружающей среде (см. [18]), то мы должны заключить, что в

случае прекурсора внутренний удар является патологически слабым. В принципе, нельзя исключать, что прекурсор с его послесвечением существенно отличается по своему механизму от основного эпизода гамма-всплеска.

Насколько нам известно, это первый случай обнаружения послесвечения прекурсора. К сожалению, очень маловероятно, что мы сможем наблюдать такое послесвечение непосредственно в ближайшем будущем, тем не менее, вероятно, это можно будет статистически обнаружить с использованием существующих баз данных. Если наша интерпретация высокоэнергетической эмиссии после прекурсора, как результата внешней ударной волны, верна, то можно отвергнуть некоторые теоретические модели прекурсов. Любая модель, основанная на эволюции единственной струи, описывающей и прекурсор, и основной эпизод (например, модель фотосферного излучения [38]), не удовлетворяет наблюдению двух независимых ударных волн. Что касается основного послесвечения, оно является самым ярким, как и сам GRB 221009. В других отношениях (относительный энергетический поток, спектр, закон затухания) оно выглядит типичным. Послесвечение из-за своей яркости видно в данных Fermi в течение двух дней и могло бы быть видно даже дольше с помощью черенковских телескопов, если бы не плохие условия наблюдения, включая яркую луну. Коллаборация HAWC сообщила об отсутствии сигнала через 8 ч после события и установила верхний предел $4.16 \cdot 10^{-12}$ эрг/см²/с [8]. Этот верхний предел находится в явном противоречии с данными Fermi, если не предполагать резкий спектральный завал между ~ 10 ГэВ и энергетическими диапазонами в теравольт. В принципе, такой спектральный завал в диапазоне 0.1–1 ТэВ возможен из-за γ – γ поглощения в источнике. Оптические фотоны, испускаемые на промежуточном этапе, могут играть роль поглотителя для фотонов высокой энергии. Пример численно смоделированного спектра с завалом при энергии около ТэВ приведен в [29]. Эта проблема требует отдельного исследования с использованием обширных численных симуляций, так как она очень сложна. В нее входят такие эффекты, как загрузка внешней среды парами [39], ее предускорение и динамика ударной волны [40]. Мы считаем, что в определенном диапазоне параметров возможно воспроизвести спектральный завал, который может объяснить противоречие между потоком ГэВ и верхним пределом HAWC. Однако другие гамма-всплески не имеют такого спада в своих послесвечениях, что подтверждается данными черенковских телескопов для других событий (см.

данные Fermi и MAGIC на рис. 6). Более того, фотон с энергией 400 ГэВ, обнаруженный через 9 ч, является аргументом против спектрального завала.

Благодарим команду Fermi за отличную базу данных и NASA за политику открытых данных.

Работа И. Ткачева была поддержана грантом Российского научного фонда # 23-42-00066.

1. P. Veres, E. Burns, E. Bissaldi et al. (Fermi GBM Team), GCN Circulars **32636** (2022).
2. S. Lesage, P. Veres, O. J. Roberts et al. (Fermi GBM Team), GCN Circulars **32642** (2022).
3. M. A. Williams, J. A. Kennea, S. Dichiara et al. (Collaboration), ApJ **946**, L24 (2023).
4. I. Lapshov, S. Molkov, I. Mereminsky et al. (SRG/ART-XC Team), GCN Circulars **32663** (2022).
5. D. Frederiks, A. Lysenko, A. Ridnaia et al. (Konus-Wind Team), GCN Circulars **32668** (2022).
6. Z. Cao, F. Aharonian, Q. An et al. (LHAASO Collaboration), Science **380**, 1390 (2023).
7. D. D. Dzheppuev, Y. Z. Afashokov, I. M. Dzaparova et al. (Collaboration), ATel **15669** (2022).
8. H. Ayala, R. Alfaro, J. C. Arteaga-Velazquez et al. (Collaboration), GCN Circulars **32683** (2022).
9. G. Galanti, L. Nava, M. Roncadelli, and F. Tavecchio, arXiv:2210.05659 [astro-ph.HE].
10. S. V. Troitsky, Pis'ma v ZhETF **116**, 745 (2022).
11. A. Y. Smirnov and A. Trautner, Phys. Rev. Lett. **131**, 021002 (2023).
12. J. D. Finke and S. Razzaque, ApJ **942**, L21 (2023).
13. S. Troitsky, arXiv:2307.08313 [astro-ph.HE].
14. T. A. Dzhatdov, E. I. Podlesnyi, and G. I. Rubtsov, arXiv:2306.05347 [astro-ph.HE].
15. M. Ajello, W. B. Atwood, M. Axelsson et al. (Collaboration), ApJ **256S**, 12 (2021).
16. C. Meegan, G. Lichti, P. N. Bhat et al. (Collaboration), ApJ **702**, 791 (2009).
17. A. M. Beloborodov, B. E. Stern, and R. Svensson, ApJ **535**, 158 (2000).
18. T. Piran, Rev. Mod. Phys. **76**, 1143 (2005).
19. R. A. Chevalier and Zh.-Y. Li, ApJ **520**, L29 (1999).
20. H. Ito, A. Levinson, B. E. Stern, and S. Nagataki, MNRAS **474**, 2828 (2018).
21. L. Nava, Int. J. Mod. Phys. D **27**, 1842003 (2018).
22. D. Frederiks, D. Svinkin, A. L. Lysenko, S. Molkov, A. Tsvetkova, M. Ulanov, A. Ridnaia, A. A. Lutovinov, I. Lapshov, A. Tkachenko, and V. Levin, ApJ **949**, L7 (2023).
23. R. Pilleri, E. Bissaldi, N. Omodei, G. La Mura, and F. Longo, ATel **15656** (2022).
24. Z.-Q. Xia, Y. Wang, Q. Yuan, and Y.-Z. Fan, arXiv:2210.13052 [astro-ph.HE].
25. M. Ackermann, M. Ajello, K. Asano et al. (Collaboration), Science **343**, 42 (2014).

26. H. Abdalla, R. Adam, F. Aharonian et al. (Collaboration), *Nature* **575**, 464 (2019).
27. V. A. Acciari, S. Ansoldi, L. A. Antonelli et al. (MAGIC Collaboration), *Nature* **575**, 459 (2019).
28. H. Abdalla, F. Aharonian, F. Ait Benkhali et al. (H.E.S.S. Collaboration), *Science* **372**, 1081 (2021).
29. D. Miceli and L. Nava, *Galaxies* **10**, 66 (2022).
30. T. Laskar, K. D. Alexander, R. Margutti et al. (Collaboration), *ApJ* **946**, L23 (2023).
31. R. Y. Liu, H. M. Zhang, and X. Y. Wang, *ApJ* **943**, L2 (2023).
32. F. Nappo, G. Ghisellini, G. Ghirlanda, A. Melandri, L. Nava, and D. Burlon, *MNRAS* **445**, 1625 (2014).
33. T. M. Koshut, C. Kouveliotou, W. S. Paciesas, J. van Paradijs, G. N. Pendleton, M. S. Briggs, G. J. Fishman, and C. A. Meegan, *ApJ* **452**, 145 (1995).
34. E. Troja, S. Rosswog, and N. Gehrels, *ApJ* **723**, 1711 (2010).
35. D. Lazzati, *MNRAS* **357**, 722 (2005).
36. S. Zhu, *PhD thesis, Univ. of Maryland* (2015); <https://doi.org/10.13016/M2CH9N>.
37. P. Minaev, A. Pozanenko, I. Chelovekov (GRB IKI FuN), *GCN Circulars* **32819** (2022).
38. M. Lyutikov and V. Usov, *ApJ* **543**, L129 (2000).
39. C. Thompson and P. Madau, *ApJ* **538**, 105 (2000).
40. A. M. Beloborodov, *ApJ* **565**, 808 (2002).

Эволюция люминесцентных свойств одиночных нанокристаллов перовскита CsPbBr_3 в процессе фотодеградации

В. А. Баитова^a, М. А. Князева^{a,c}, И. А. Муканов^{b,g}, А. О. Тарасевич^c, А. В. Наумов^{b,c,d}, А. Г. Сон^{e,g},
С. А. Козюхин^{e,f}, И. Ю. Еремчев^{b1)}

^aНациональный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 105066 Москва, Россия

^bИнститут спектроскопии РАН, 108840 Москва, Россия

^cТроицкое обособленное подразделение ФИАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

^dМосковский педагогический государственный университет, 119435 Москва, Россия

^eИнститут общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова, 119991 Москва, Россия

^fТомский государственный университет, Химический факультет, 634050 Томск, Россия

^gНациональный исследовательский университет МФТИ, 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 5 сентября 2023 г.

После переработки 13 сентября 2023 г.

Принята к публикации 13 сентября 2023 г.

Представлены результаты экспериментального исследования эволюции процесса мерцания люминесценции одиночных нанокристаллов перовскита CsPbBr_3 с характерным размером ~ 25 нм в процессе фотодеградации. Продемонстрировано, что вместе со смещением пика люминесценции в коротковолновую область и уменьшением средней интенсивности люминесценции возрастает роль безызлучательных Оже-процессов, лежащих в основе зарядового механизма мерцания. Использован метод определения механизма мерцания, основанный на анализе антигруппировки фотонов $g^2(0)$, а также скоростей экситонной и биэкситонной рекомбинации. Полученные данные позволили выявить переход от ловушечного механизма мерцания к зарядовому при изменении размеров одиночного нанокристалла CsPbBr_3 .

DOI: 10.31857/S1234567823200041, EDN: oquxod

Полупроводниковые нанокристаллы со структурой перовскита CsPbX_3 ($X = \text{Br}, \text{Cl}, \text{I}$) обладают высоким потенциалом применения в качестве следующего поколения фотоэлектрических устройств в силу их специфических оптических и электрических свойств: перовскиты обладают высоким квантовым выходом люминесценции, высокой подвижностью зарядов, большой длиной диффузии электронов и дырок, широким диапазоном перестройки длин волн люминесценции [1, 2]. Слабое влияние дефектных состояний на свойства перовскитов позволяет упростить и удешевить технологию изготовления полупроводниковых устройств, что играет большую роль при создании фотоэлектрических и светоизлучающих устройств на основе перовскитов – светодиодов [3], источников света с заданной цветовой температурой [4], солнечных батарей [5], оптоэлектронных устройств [6], активных элементов для оптического охлаждения [7], лазеров [8].

Существующие ограничения использования нанокристаллов перовскитов связаны с недостаточной фотостабильностью и чувствительностью к внешним параметрам: влажности, составу и температуре окружающей среды [9, 10]. На уровне одиночных нанокристаллов наблюдается мерцание люминесценции – процесс случайного во времени изменения квантового выхода люминесценции, который на ансамблевом уровне приводит к понижению общего квантового выхода. Стоит отметить, что данный эффект присущ широкому классу одиночных излучателей, включая одиночные молекулы [11], π -сопряженные полимеры [12], полупроводниковые квантовые точки [13], субмикронные [14] и микронные [15] кристаллы перовскита. Известные к настоящему времени работы по теории мерцания полупроводниковых нанокристаллов связывают изменение квантового выхода люминесценции с возникновением обратимых безызлучательных каналов релаксации посредством зарядового [16] и ловушечного [17, 18] механизмов. Так, в соответствии с заря-

¹⁾e-mail: eremchev@isan.troitsk.ru

довым механизмом, мерцание люминесценции объясняется ионизацией и нейтрализацией одиночного нанокристалла. В ионизованном состоянии энергия рекомбинирующей пары может передаваться третьей частице в результате Оже-процесса. Поэтому такое трехчастичное состояние (трионное) характеризуется меньшим квантовым выходом люминесценции по сравнению с экситонным. Необходимо отметить, что в полупроводниках Оже-ионизация проявляется при высоких концентрациях носителей заряда ($n \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$) [19], что всегда выполняется при малых размерах кристаллов ($\sim 10 \text{ нм}$). В кристаллах же большего размера эффективность зарядового механизма должна быть существенно меньше из-за низкой плотности носителей заряда в трионном состоянии. Альтернативный механизм мерцания связывают с связанными уровнями энергии в запрещенной зоне, связанных со структурными дефектами в полупроводниковых нанокристаллах. Миграция ионов в перовскитах (фотоиндуцированная [20], термоиндуцированная [21]) может быть причиной возникновения и исчезновения дефектных состояний [22] – эффективных тушителей люминесценции. Временная флуктуация числа дефектных состояний, описанная в моделях суперэффективных тушителей люминесценции [23] и множественных рекомбинационных центров (MRC-модель) [16], а также вариация скорости захвата носителей заряда одним дефектным состоянием [24] приводят к вариации квантового выхода люминесценции – мерцанию люминесценции.

Помимо эффекта мерцания, под воздействием фотовозбуждения происходит постепенное изменение свойств нанокристаллов, проявляющееся в сдвиге пика люминесценции в синюю область спектра и уменьшении сечения поглощения – фотоиндуцированная деградация нанокристаллов [9, 10, 25–27]. Данный эффект был обнаружен в металлоорганических перовскитах [25] и полностью неорганических перовскитах [9, 26], в отдельных нанокристаллах, в том числе, квантовых точках [26], а также в субмикронных и микронных частицах [25] и в пленках из нанокристаллов [28]. К процессу фотодеградации также нужно отнести эффект фотоиндуцированного пространственного разделения (фазовой сегрегации) ионов галогена в “смешанных” перовскитах [23]. Фотодеградация может быть как необратимым процессом в случае одиночных нанокристаллов [9, 26], так и обратимым в случае наличия защитной оболочки из оксида кремния у одиночных нанокристаллов [27] или при плотной упаковке нанокристаллов [28]. Сдвиг спектра в коротковолновую область объясняют квантовым размерным эффектом и связывают с

уменьшением эффективного размера кристалла по одному или нескольким направлениям. Это подтверждается прямыми экспериментами с использованием совмещенной атомно-силовой и люминесцентной микроскопии, в которых наблюдается скоррелированное уменьшение размера частиц и сдвиг спектра люминесценции в процессе фотодеградации [29]. Изменение эффективных размеров кристаллов может быть связано как с внутренней перестройкой кристалла в результате миграции ионов, так и с процессом окисления на поверхности. Последний механизм считается основным в фотодеградации “традиционных” коллоидных квантовых точек, синтезированных из селенида кадмия и селенида свинца [30–32].

Изучение фотодеградации перовскитов важно с точки зрения понимания природы процесса [33] и совершенствования методов синтеза фотостабильных материалов. Помимо этого, с уменьшением эффективных размеров нанокристалла происходит изменение скоростей излучательной и безызлучательной рекомбинации, вероятности Оже-процессов [34], определяющих рекомбинационную динамику зарядов в нанокристаллах. Поэтому эффект фотоиндуцированной деградации может быть использован для непосредственного исследования эволюции фотофизических свойств одиночных нанокристаллов при непрерывном изменении их физических размеров. В частности, большой интерес представляет вопрос об изменении механизмов и свойств мерцания, вызванного уменьшением размера одиночной люминесцирующей наночастицы. Изучению данного вопроса посвящена настоящая работа.

Исследование было проведено с нанокристаллами перовскита CsPbBr₃ с характерными размерами 25–29 нм и пиком люминесценции на длине волны $\sim 518 \text{ нм}$. Все операции, относящиеся к синтезу и выделению наночастиц CsPbBr₃, осуществляли по методике горячего впрыска, описанной в работе [35] в атмосфере аргона с использованием абсолютированных растворителей. Фазовый состав исследовался методом рентгенофазового анализа (РФА), размеры частиц были определены с помощью растрового просвечивающего электронного микроскопа (РПЭМ) и динамического светорассеяния (ДСР).

Эксперименты с одиночными нанокристаллами были проведены с использованием уникального люминесцентного микроскопа-спектрометра, позволяющего исследовать сигналы от единичных излучателей в режиме счета одиночных фотонов и проводить эксперименты по оптической двумерной [36] и трехмерной [37] наноскопии. Подробное описание экспериментальной установки и методик может быть

найденно в работах [38, 39]. Возбуждение нанокристаллов производилось на длине волны 400 нм импульсным лазерным источником (вторая гармоника от сигнальной волны параметрического осциллятора Тополь Авеста). Период повторения лазерных импульсов, составляющий 1 мкс, существенно превосходил характерные времена затухания фотолюминесценции нанокристаллов (~ 10 нс). Люминесцентный сигнал измерялся в режиме коррелированного по времени счета одиночных фотонов с помощью двух детекторов (MicroPhotonDevices, QE $\sim 50\%$ на 500 нм, DCR ~ 10 Гц) в схеме типа Хэнбери Брауна и Твисса (ХБТ) с временным разрешением ~ 165 пс. Это позволяло исследовать кросс-корреляционную функцию второго порядка $g^2(t)$ (в частности, антигруппировку люминесценции), люминесцентную динамику (мерцание люминесценции), а также времена жизни флуоресценции; в частности, времена жизни экситонного и биэкситонного состояний.

Для регистрации спектров люминесценции одиночных нанокристаллов CsPbBr₃ использовался спектрометр с коррекцией абберации астигматизма Sol Instruments. На рисунке 1 приведены примеры временного поведения спектров люминесценции при непрерывной экспозиции при плотностях мощности возбуждающего излучения 1.125 и 7.5 Вт/см². В обоих примерах 1a, 1b наблюдается сдвиг спектров люминесценции в синюю область (от 518 до 500 и 490 нм, соответственно), что свидетельствует о процессе фотоиндуцированной деградации нанокристаллов. На рисунках 1c, d показаны соответствующие двумерные графики, на которых отображены временные последовательности спектров (вдоль вертикальной оси). Видно, что помимо сдвига спектров во времени, наблюдается мерцание (темные промежутки – горизонтальные полосы на рис. 1c и d) и снижение средней интенсивности люминесценции (интенсивность закодирована цветом). Это, в соответствии с работой [29], может быть объяснено уменьшением эффективных размеров нанокристалла в результате фотоиндуцированной деградации. Также на уменьшение объема нанокристалла, как будет показано ниже, указывает факт появления антигруппировки фотонов в сигнале люминесценции фотодеградировавшего нанокристалла.

В основе одного и того же эффекта мерцания могут быть заложены различные механизмы [16, 18, 24], в разной степени проявляющиеся в нанокристаллах [40–42]. Анализ временных зависимостей интенсивности люминесценции (флуоресцентных траекторий) недостаточен для определения преобладающего механизма мерцания. Необходимы дополнительные фи-

зические величины, характеризующие фотодинамику носителей заряда в состояниях с высоким и низким квантовым выходом люминесценции в мерцающей траектории (в ярком и тусклом люминесцентном состоянии). Такими физическими величинами могут быть скорости излучательной рекомбинации экситонного и биэкситонного состояний (k_r^x, k_r^{xx}), поскольку их отношение зависит от наличия дополнительного заряда в нанокристалле.

Рассмотрим этот вопрос подробнее. Скорость би-молекулярной рекомбинации определяется произведением числа электронов и дырок, поэтому для нейтрального кристалла соотношение скоростей излучательной рекомбинации биэкситона и экситона k_r^{xx}/k_r^x будет составлять значение 4. Схематично возможные каналы излучательной рекомбинации для экситона и биэкситона в нанокристалле показаны на рис. 2a, где видно, что число возможных каналов для биэкситона в 4 раза больше, чем для экситона. Это соотношение остается постоянным независимо от наличия или отсутствия дефектного ловушечного состояния. Поэтому переход в тусклое состояние в мерцающей траектории по ловушечному механизму не должен приводить к изменению соотношения k_r^{xx}/k_r^x . В этом случае меняются только времена жизни люминесценции экситонного τ_{fl}^x и биэкситонного τ_{fl}^{xx} состояний из-за появления дополнительного канала безызлучательной релаксации.

Если же безызлучательный канал связан с появлением дополнительного заряда, то скорости излучательной рекомбинации “заряженного” экситонного (трионного) и “заряженного” биэкситонного состояний нанокристалла увеличатся по сравнению с нейтральным состоянием: $k_r^{x*} = 2k_r^x$, $k_r^{xx*} = 6k_r^x$ (звездочкой в верхних индексах отмечено заряженное состояние кристалла). На рисунке 2b схематично показан этот случай с возможными каналами излучательной рекомбинации, поясняющий увеличение скорости. В результате это приводит к изменению соотношения $k_r^{xx*}/k_r^{x*} \sim 3$ в тусклом состоянии. Необходимо отметить, что в некоторых случаях может быть $k_r^{xx*} = k_r^{xx} = 4k_r^x$, как было обнаружено в [43] для квантовых точек CdSe. Однако это должно привести к еще большему отличию соотношения в заряженном и нейтральном состояниях нанокристалла. Поэтому переход в тусклое состояние по зарядовому механизму будет сопровождаться изменением соотношения k_r^{xx}/k_r^x .

Для определения соотношения скоростей k_r^{xx}/k_r^x может быть использована связь между величиной $g^2(0)$ и квантовыми выходами экситонной и биэкситонной люминесценции. В режиме слабой накачки,

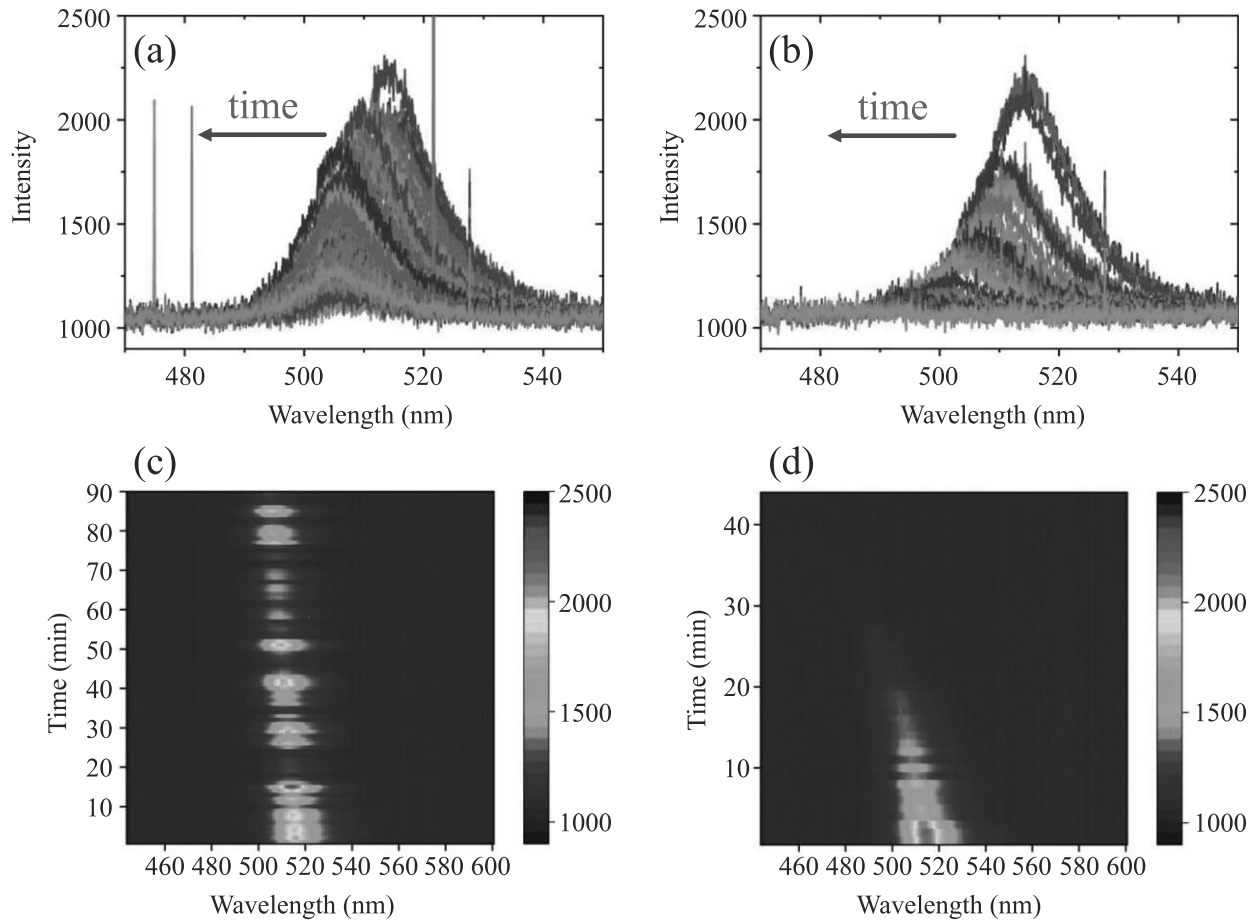


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эволюция спектров люминесценции одиночных нанокристаллов CsPbBr₃ в процессе фотодегradации. (a), (b) – Примеры спектров, измеренных в разные моменты времени и соответствующие им (c), (d) эволюции спектров в виде двумерных графиков. Время экспозиции для каждого из спектров – 60 с. Плотности мощности возбуждающего излучения 1.125 и 7.5 Вт/см² для (a), (c) и (b), (d) соответственно. Провалы интенсивности связаны с мерцанием люминесценции. Резкие (точечные) выбросы интенсивности в спектрах на графиках (a), (b) связаны со случаями регистрации космических частиц ПЗС матрицей спектрометра

когда среднее число рожденных электрон-дырочных пар за единичный лазерный импульс $\langle N_{e-h} \rangle \ll 1$, значение g^2 -функции при $t = 0$ в соответствии с [44] будет определяться следующим выражением:

$$g^2(0) \approx \frac{QY^{xx}}{QY^x} = \frac{k_r^{xx}}{k_r^x} \cdot \frac{\tau_{fl}^{xx}}{\tau_{fl}^x}, \quad (1)$$

где QY^x , QY^{xx} – квантовые выходы экситонной и биэкситонной люминесценции.

Величина $g^2(0)$ получается непосредственно из анализа экспериментально измеренной кросс-корреляционной функции [39]. Для оценки времен τ_{fl}^x и τ_{fl}^{xx} использовалась методика анализа коррелированных событий в схеме ХБТ [45], позволяющая разделить вклады экситонной и биэкситонной составляющей. Принцип метода схематично показан на рис. 2с: в эксперименте анализируются только

случаи регистрации двух фотонов в схеме ХБТ за один период повторения лазера. При условии слабой накачки $\langle N_{e-h} \rangle \ll 1$ такие случаи соответствуют преимущественно ситуации возбуждения двух электрон-дырочных пар в нанокристалле и их излучательной рекомбинации. Тогда в такой выборке распределение относительных времен для первого из пары фотонов соответствует затуханию биэкситонной люминесценции, а второго фотона – экситонной составляющей люминесценции. Необходимо подчеркнуть, что данный метод чувствителен к темновым шумам детекторов одиночных фотонов и наличию скоррелированных ложных срабатываний (*afterpulsing*). В нашем эксперименте оба эти фактора не играли сколько-нибудь заметной роли.

Описанная методика была применена к анализу флуоресцентного сигнала одиночных на-

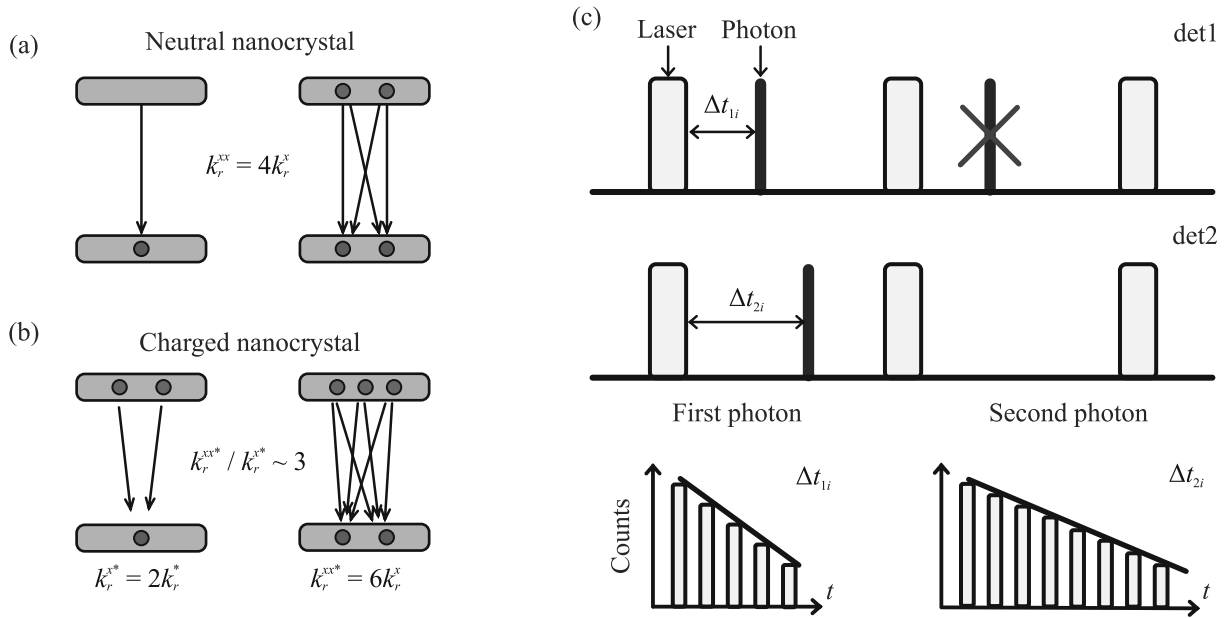


Рис. 2. (Цветной онлайн) Иллюстрация к методу исследования механизма мерцания. Комбинаторика возможных путей излучательной рекомбинации для экситона и биэкситона в нейтральном (а) и заряженном (б) состоянии нанокристалла. (с) – Схема, иллюстрирующая принцип получения кривых затухания экситонной и биэкситонной составляющих сигнала люминесценции из анализа случаев регистрации совпадений в схеме Хэнбери Брауна и Твисса [45]. Распределение относительных времен регистрации первого фотона из пары Δt_{1i} соответствует кинетике затухания биэкситона, а второго фотона Δt_{2i} – кинетике затухания люминесценции экситона

нокристаллов перовскита CsPbBr_3 . Анализ значения кросс-корреляционной функции, а также времен жизни экситона и биэкситона производился по выборкам фотонов, соответствующих состояниям с разным квантовым выходом люминесценции по аналогии с методом, описанным в работе [39]. Это позволило получить соотношения скоростей k_r^{xx}/k_r^x для различных состояний излучателя в процессе мерцания (яркого, тусклого) и для различных моментов времени процесса фотоиндуцированной деградации.

Фрагмент временной зависимости сигнала мерцающей люминесценции, соответствующий началу измерения (когда фотоиндуцированной деградацией можно пренебречь, $\lambda_{\text{lum}} = 518 \text{ нм}$), показан на рис. 3а. Плотность мощности возбуждающего излучения $\sim 1 \text{ Вт/см}^2$, среднее число фотовозбужденных электрон-дырочных пар за один лазерный импульс $\langle N_{e-h} \rangle \sim 0.2$. Значение кросс-корреляционной функции $g^2(0)$ для представленного отрезка (рис. 3б) демонстрирует отсутствие эффекта антигруппировки. Вместо этого наблюдается небольшая группировка фотонов $g^2(0) \sim 1.1$, связанная с тем, что квантовый выход биэкситонной люминесценции превышает квантовый выход экситонной люминесценции

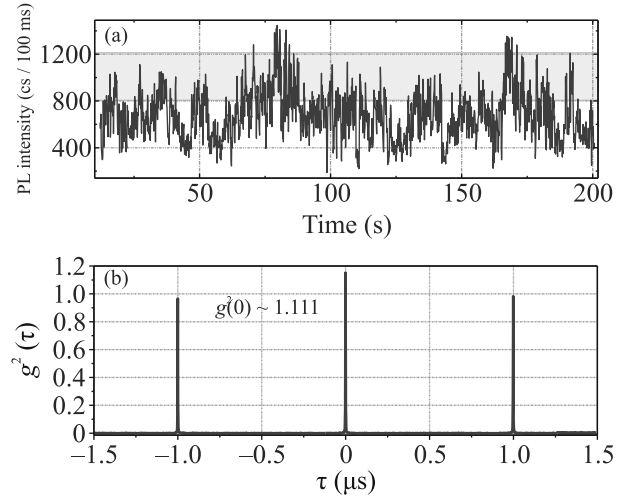


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Фрагмент мерцающей флуоресцентной траектории, соответствующий началу измерения, когда фотоиндуцированной деградацией можно пренебречь, $\lambda_{\text{lum}} = 518 \text{ нм}$. (б) – Кросс-корреляционная функция 2-го порядка $g^2(t)$ и значение $g^2(0)$, соответствующие яркому уровню данной траектории (выделен желтым прямоугольником)

($QY^{xx} > QY^x$). Это связано с бимолекулярным характером излучательной рекомбинации и возмож-

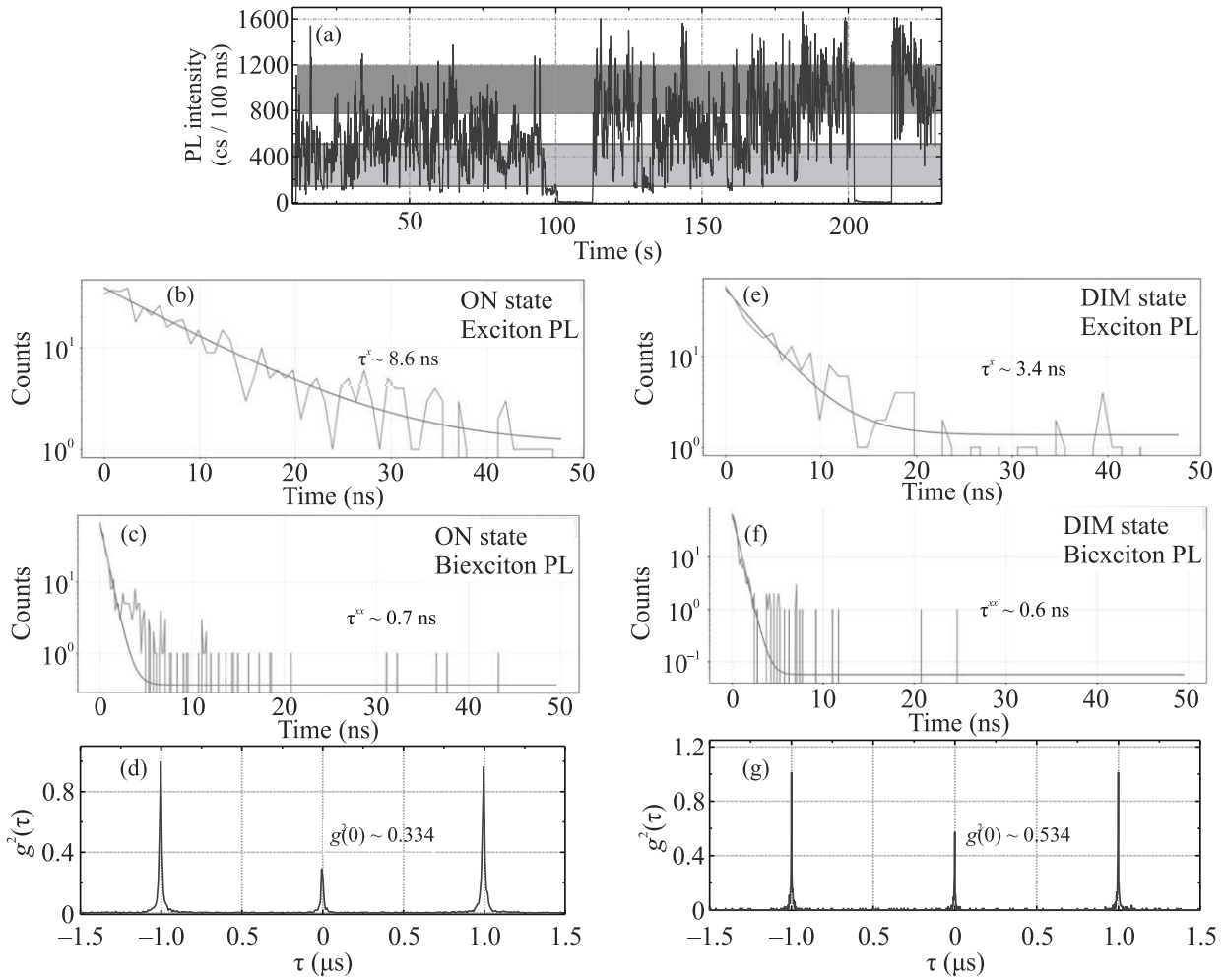


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Фрагмент флуоресцентной траектории одиночного нанокристалла CsPbBr₃ из конца 2-часового измерения, соответствующий фотодеградировавшему состоянию нанокристалла ($\lambda_{lum} \sim 500$ нм). Цветными прямоугольниками выделены анализируемые интервалы интенсивности: желтым – от 900 до 1300 отсчетов/100 мс – яркое состояние (ON state), зеленым – от 50 до 500 отсчетов/100 мс – тусклое состояние (DIM state). Провалы уровня интенсивности до нуля соответствуют моментам измерения спектров. (b), (e) – Кривые затухания люминесценции и значения времен жизни экситонного состояния для яркого и тусклого уровней соответственно. (c), (f) – Кривые затухания биэкситонной люминесценции и значения времен жизни биэкситонного состояния для яркого и тусклого уровней соответственно. (d), (g) – Кросс-корреляционные функции $g^2(t)$ и значения $g^2(0)$ для яркого и тусклого уровней интенсивности люминесценции

но в том случае, если вклад Оже-процессов k_A^{xx} в безызлучательную составляющую $k_{nr}^{xx} + k_A^{xx}$ рекомбинации биэкситона пренебрежимо мал. Действительно: $QY^{xx} = \frac{k_r^{xx}}{k_r^{xx} + k_{nr}^{xx} + k_A^{xx}} \approx \frac{k_r^{xx}}{k_r^{xx} + k_{nr}^{xx}} = \frac{4k_r^{xx}}{4k_r^{xx} + 2k_{nr}^{xx}} > \frac{k_r^{xx}}{k_r^{xx} + k_{nr}^{xx}} = QY^x$, где k_{nr}^{xx} – скорость безызлучательных процессов рекомбинации за исключением Оже. Но тогда и для трионного состояния безызлучательная Оже-рекомбинация не будет играть существенной роли, поскольку $k_A^{xx} > 2k_A^{x*}$, где k_A^{x*} – скорость Оже-ионизации для трехчастичного состояния (триона) в нанокристалле. Следовательно, в

данном случае Оже-рекомбинация не может давать заметного вклада в тушение экситонной люминесценции в заряженном состоянии нанокристалла. И поэтому зарядовый механизм не может приводить к эффекту мерцания люминесценции на рассматриваемом участке траектории. Необходимо также отметить, что анализ соотношения скоростей k_r^{xx}/k_r^x для яркого уровня и тусклого в данном случае дает значение, близкое к 4. Однако вывод не поменялся бы и при значении 3 для обоих состояний одновременно. Это лишь говорило бы о том,

что и яркое, и тусклое состояние экситонной люминесценции кристалла в данном случае являются заряженными, но это не приводит к уменьшению квантового выхода и не является причиной мерцания.

Участок мерцающей люминесцентной траектории из конца двухчасового измерения того же нанокристалла показан на рис. 4а. Появление антигруппировки фотонов (рис. 4d, g) свидетельствует об уменьшении квантового выхода биэкситонной люминесценции по отношению к экситонной $\frac{Q_{Y^{xx}}}{Q_{Y^x}} < 1$, что связано с ростом скорости безызлучательной Оже-ионизации k_A^{xx} для биэкситонного состояния. Поскольку вероятность Оже-ионизации для состояния с фиксированным числом электрон-дырочных пар зависит от объема ($k_A^{xx} \sim 1/V$ [46]), то можно сделать вывод об уменьшении эффективного размера кристалла в результате процесса фотодегградации. Этот вывод согласуется с предположением о связи сдвига пика люминесценции в коротковолновую область спектра с уменьшением размера нанокристалла (посредством квантового размерного эффекта). Это дает нам возможность сделать оценку эффективного размера фотодеградирувавшего нанокристалла ($\lambda_{lum} \sim 500$ нм): $l \sim 7.5$ нм [46].

Анализ времен жизни для данного участка люминесцентной траектории был проведен в соответствии с процедурой, описанной ранее. Для яркого (ON) уровня значения времен жизни биэкситона и экситона составили, соответственно, $\tau_{fl}^{xx} = 0.7$ нс и $\tau_{fl}^x = 8.6$ нс (соответствующие кривые затухания показаны на рис. 4с, b). Значение кросс-корреляционной функции $g^2(0) = 0.334$ (рис. 4d). Полученное соотношение скоростей биэкситонной и экситонной рекомбинации для данного уровня интенсивности $k_r^{xx}/k_r^x = 4.1$, что соответствует люминесценции незаряженного кристалла. Анализ нижнего (тусклого, DIM) уровня интенсивности показал $\tau_{fl}^{xx} = 0.6$ нс (рис. 4f), $\tau_{fl}^x = 3.4$ нс (рис. 4е), $g^2(0) = 0.534$ (рис. 4g), что дает $k_r^{xx}/k_r^x \sim 3.026$. Изменение соотношения излучательных скоростей в тусклом состоянии связано с возникновением заряженных экситона и биэкситона, что свидетельствует о преимущественном зарядовом механизме мерцания в данном случае. Таким образом, уменьшение эффективных размеров нанокристалла в процессе фотодегградации, сопровождаемое изменением спектральных характеристик, приводит к возрастанию роли Оже-процессов, а, следовательно, к возможности проявления зарядового механизма мерцания люминесценции, помимо ловушечного.

В данной работе был рассмотрен вопрос об эволюции механизмов мерцания люминесценции одиноч-

ных кристаллов перовскита CsPbBr₃ при изменении их размеров в процессе фотоиндуцированной деградации. Исследование проводилось методами люминесцентной микроскопии и коррелированного по времени счета одиночных фотонов, совмещенных с параллельной регистрацией эволюции спектров люминесценции НК.

Для определения механизмов мерцания люминесценции одиночного нанокристалла использовался метод, основанный на оценке соотношения скоростей излучательной рекомбинации биэкситона и экситона k_r^{xx}/k_r^x . Для этого использовались экспериментально измеряемые значения времен жизни экситонных (τ_{fl}^x) и биэкситонных (τ_{fl}^{xx}) состояний для яркого и тусклого состояний мерцания люминесценции, а также значения кросс-корреляционных функций 2-ого порядка $g^2(0)$. Появление эффекта антигруппировки фотонов для фотодеградирувавшего одиночного нанокристалла свидетельствует об уменьшении его размеров, что согласуется с предположением о связи сдвига пика люминесценции в коротковолновую область спектра с уменьшением размера нанокристалла (посредством квантового размерного эффекта). Показано, что в процессе фотодегградации нанокристалла наблюдается переход от единственного ловушечного механизма мерцания к зарядовому, что связано с возрастанием роли Оже-процессов при уменьшении размеров нанокристалла.

Работа поддержана в рамках темы Государственного задания ФГБУН Института спектроскопии РАН (FFUU-2022-0003). Авторы входят в состав Ведущей научной школы РФ (грант Президента РФ НШ-776.2022.1.2). Работа по синтезу перовскитных наночастиц выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда # 23-19-00884.

1. J. Shamsi, A. S. Urban, M. Imran, L. De Trizio, and L. Manna, Chem. Rev. **119**(5), 3296 (2019).
2. A. K. Jena, A. Kulkarni, and T. Miyasaka, Chem. Rev. **119**(5), 3036 (2019).
3. J. Song, J. Li, X. Li, L. Xu, Y. Dong, and H. Zeng, Adv. Mater. **27**(44), 7162 (2015).
4. О. И. Пачинко, А. А. Романенко, В. В. Крюков, Л. Л. Троцюк, О. С. Кулакович, С. В. Гапоненко, Журнал прикладной спектроскопии **90**(1), 61 (2023).
5. S. Ullah, J. Wang, P. Yang, L. Liu, Sh.-E. Yang, T. Xia, H. Guo, and Yo. Chen, Materials Advances **2**(2), 646 (2021).
6. J. Song, L. Xu, J. Li, J. Xue, Y. Dong, X. Li, and H. Zeng, Adv. Mater. **28**(24), 4861 (2016).
7. К. С. Секербаев, Г. К. Мусабек, Н. С. Покрышкин, В. Г. Якунин, Е. Т. Таурбаев, Е. Шабдан, Ж. Н. Уте-

- гулов, В. С. Чирвоный, В. Ю. Тимошенко, Письма в ЖЭТФ **114**(7–8), 515 (2021).
8. S. Yakunin, L. Protesescu, F. Krieg, M. I. Bodnarchuk, G. Nedelcu, M. Humer, G. De Luca, M. Fiebig, W. Heiss, and M. V. Kovalenko, *Nat. Commun.* **6**(1), 8056 (2015).
 9. G. Yuan, C. Ritchie, M. Ritter, S. Murphy, D. E. Gómez, and P. Mulvaney, *J. Phys. Chem. C* **122**(25), 13407 (2017).
 10. Z. Wang, Z. Zhang, L. Xie, S. Wang, Ch. Yang, Ch. Fang, and F. Hao, *Adv. Opt. Mater.* **10**(3), 2101822 (2021).
 11. R. M. Dickson, A. B. Cubitt, R. Y. Tsien, and W. E. Moerner, *Nature* **388**(6640), 355 (1997).
 12. D. A. V. Bout, W.-T. Yip, D. H. Hu, D.-K. Fu, T. M. Swager, and P. F. Barbara, *Science* **277**, 1074 (1997).
 13. M. Nirmal, B. O. Dabbousi, M. G. Bawendi, J. J. Macklin, J. K. Trautman, T. D. Harris, and L. E. Brus, *Nature* **383**, 802 (1996).
 14. Y. Tian, A. Merdasa, M. Peter, M. Abdellah, K. Zheng, C. S. Ponseca, T. Pullerits, A. Yartsev, V. Sundstrom, and I. G. Scheblykin, *Nano Lett.* **15**, 1603 (2015).
 15. A. Halder, N. Pathoor, A. G. Chowdhury, and S. K. Sarkar, *J. Phys. Chem. C* **122**(27), 15133 (2018).
 16. A. L. Efros and M. Rosen, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1110 (1997).
 17. P. A. Frantsuzov and R. A. Marcus, *Phys. Rev. B* **72**, 155321 (2005).
 18. P. A. Frantsuzov, S. Volkan-Kacso, and B. Janko, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 207402 (2009).
 19. I. Pelant and J. Valenta, *Luminescence Spectroscopy of Semiconductors*, Oxford University Press, Oxford (2012).
 20. Д. С. Гец, Е. Ю. Тигунцева, А. С. Берестенников, Т. Г. Ляшенко, А. П. Пушкарев, С. В. Макаров, А. А. Захидов, Письма в ЖЭТФ **107**(12), 768 (2018).
 21. M. Gerhard, B. Louis, R. Camacho, A. Merdasa, J. Li, A. Kiligaridis, A. Dobrovolsky, J. Hofkens, I. G. Scheblykin, *Nat. Commun.* **10**, 1698 (2019).
 22. R. Chen, J. Li, A. Dobrovolsky, S. Gonzalez-Carrero, M. Gerhard, M. E. Messing, V. Chirvony, J. Pérez-Prieto, and I. G. Scheblykin, *Adv. Opt. Mater.* **8**(4), 1901642 (2020).
 23. A. Merdasa, Y. Tian, R. Camacho, A. Dobrovolsky, E. Debroye, E. L. Unger, J. Hofkens, V. Sundström, and I. G. Scheblykin, *ACS Nano* **11**, 5391 (2017).
 24. E. A. Podshivaylov, M. A. Kniazeva, A. O. Tarasevich, I. Y. Eremchev, A. V. Naumov, and P. A. Frantsuzov, *J. Mater. Chem. C* **11**(25), 8570 (2023).
 25. A. Merdasa, M. Bag, Yu. Tian, E. Källman, A. Dobrovolsky, and I. Scheblykin, *J. Phys. Chem. C* **120**(19), 10711 (2016).
 26. Y.-S. Park, S. Guo, N. S. Makarov, and V. I. Klimov, *ACS Nano* **9**(10), 10386 (2015).
 27. B.-W. Hsu, Y.-T. Chuang, C.-Y. Cheng, C.-Y. Chen, Y.-J. Chen, A. Brumberg, L. Yang, Y.-Sh. Huang, R. D. Schaller, L.-J. Chen, Ch.-S. Chu, and H.-W. Lin, *ACS Nano* **15**(7), 11358 (2021).
 28. H. Zhang, X. Fu, Y. Tang, H. Wang, C. Zhang, W. W. Yu, X. Wang, Y. Zhang, and M. Xiao, *Nature Commun.* **10**(1), 1088 (2019).
 29. Y. A. Darmawan, M. Yamauchi, and S. Masuo, *The Journal of Physical Chemistry C* **124**(34), 18770 (2020).
 30. D. A. Hines, M. A. Becker, and P. V. Kamat, *J. Phys. Chem.* **116**, 13452 (2012).
 31. W. G. J. H. M. van Sark and P. L. T. M. Frederix, *J. Phys. Chem.* **105**, 8281 (2001).
 32. M. Sykora, A. Y. Kuposov, J. A. McGuire, R. K. Schulze, O. Tretiak, J. M. Pietryga, and V. I. Klimov, *ACS Nano* **4**, 2021 (2010).
 33. E. J. Juarez-Perez, L. K. Ono, I. Uriarte, E. J. Cocinero, and Ya. Qi, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11**(13), 12586 (2019).
 34. P. Huang, S. Sun, H. Lei, Y. Zhang, H. Qin and H. Zhong, *eLight* **3**(10), 3728 (2023).
 35. L. Protesescu, S. Yakunin, M. Bodnarchuk, F. Krieg, R. Caputo, Ch. H. Hendon, R. Yang, A. Walsh, and M. Kovalenko, *Nano Lett.* **15**(6), 3692 (2015).
 36. И. Ю. Еремчев, Н. А. Лозинг, А. А. Баев, А. О. Тарасевич, М. Г. Гладуш, А. А. Роженцов, А. В. Наумов, Письма в ЖЭТФ **108**(1), 26 (2018).
 37. I. Yu. Eremchev, D. V. Prokopova, N. N. Losevskii, I. T. Mynzhasarov, S. P. Kotova, and A. V. Naumov, *Phys.-Uspekhi* **65**, 617 (2022).
 38. И. Ю. Еремчев, М. Ю. Еремчев, А. В. Наумов, Успехи физических наук **189**, 312 (2019).
 39. I. Yu. Eremchev, A. O. Tarasevich, M. A. Kniazeva, J. Li, A. V. Naumov, and I. G. Scheblykin, *Nano Lett.* **23**(6), 2087 (2023).
 40. Y. S. Park, J. Lim, N. S. Makarov, V. I. Klimov, *Nano Lett.* **17**(9), 5607 (2017).
 41. I. S. Osad'ko, I. Yu. Eremchev, and A. V. Naumov, *J. Phys. Chem.* **119**, 22646 (2015).
 42. G. Yuan, D. E. Gomez, N. Kirkwood, K. Boldt, and P. Mulvaney, *ACS Nano* **12**, 3397 (2018).
 43. K. E. Shulenberger, S. C. C. t Wallant, M. D. Klein, A. R. McIsaac, T. Goldzak, D. B. Berkinsky, H. Utzat, U. Barotov, T. V. Voorhis, and M. G. Bawendi, *Nano Lett.* **21**(18), 7457 (2021).
 44. J. Zhao, O. Chen, D. B. Strasfeld, and M. G. Bawendi, *Nano Lett.* **12**(9), 4477 (2012).
 45. N. S. Makarov, S. Guo, O. Isaienko, W. Liu, I. Robel, and V. I. Klimov, *Nano Lett.* **16**(4), 2349 (2016).
 46. Y. Li, T. Ding, X. Luo, Z. Chen, X. Liu, X. Lu, and K. Wu, *Nano Research* **12**(3), 619 (2019).

Экспериментальное исследование сжимаемости плазмы гелия при давлении до 20 ТПа

М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, С. В. Ерунов, А. О. Бликов¹⁾, В. А. Огородников, С. Е. Елфимов, В. А. Аринин, В. А. Комраков, М. И. Лихутов, И. П. Максимкин

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
607188 Саров, Россия

Поступила в редакцию 19 сентября 2023 г.

После переработки 19 сентября 2023 г.

Принята к публикации 21 сентября 2023 г.

В лабораторном эксперименте с использованием сферического двухкаскадного экспериментального устройства неидеальная плазма гелия сжата до плотности $\rho \approx 14 \text{ г/см}^3$ давлением $P \approx 20 \text{ ТПа}$ (200 Мбар). Приведена конструкция сферического экспериментального устройства, выполнены оценки термодинамических параметров плазмы гелия, достигаемые в разработанном устройстве. Данные о динамике движения наружных и внутренних каскадов экспериментального устройства, использованные при выборе методики расчетов, получены в предварительном эксперименте с полусферическим макетом. Эксперимент выполнен на рентгенографическом комплексе ВНИИЭФ, состоящем из бетатронов БИМ 234.3000 с граничной энергией 60 МэВ, используемых в мультиимпульсном режиме генерации тормозного излучения с многоканальной оптико-электронной системой регистрации рентгеновских изображений. Дополнительно с бетатронами для регистрации сжатой полости оболочки использован линейный высокоточный ускоритель ЛИУ-Р-Т и пакетный регистратор изображения, состоящий из фотохромных АДС-экранов.

DOI: 10.31857/S1234567823200053, EDN: orjfb

1. Введение. В последние годы в экспериментальных исследованиях свойств сильно неидеальной плазмы гелия во ВНИИЭФ удалось продвинуться в диапазон мегабарных давлений, используя метод квазиизэнтропического сжатия газов в двухкаскадных устройствах цилиндрической и сферической геометрии с использованием мощных химических взрывчатых веществ (ВВ) [1–10]. Высокая концентрация энергии в таких объектах вызывает процессы термической ионизации и/или ионизацию давлением, так, что возникает плазма, теоретическое описание которой чрезвычайно затруднено в силу сложности происходящих при этом физических процессов. Данные о поведении гелия в области таких рекордных сжатий необходимы для верификации его уравнения состояния (УРС) в широкой области фазовой диаграммы. Изучение свойств гелия имеет и большое фундаментальное значение, так как мегабарный диапазон давлений плазмы гелия соответствует состояниям большинства внутренних частей планет-гигантов Солнечной системы и экзопланетам. Еще более высокие значения термодинамических па-

раметров плазмы реализуются в устройствах инерционного управляемого синтеза. Интерес к исследованию свойств неидеальной плазмы гелия также во многом связан и с предсказаниями существования в плотном и горячем флюиде гелия аномалий типа необычных “плазменных” (*ionization-driven*) фазовых переходов (ПФП).

В экспериментах ВНИИЭФ с гелием при равном начальном давлении газа в обоих каскадах 25 МПа свойства плазмы гелия, сжатой до плотности 8 г/см^3 в области давлений до 5000 ГПа, исследовали в [1–3]. В экспериментах [4, 5] с использованием двухкаскадной сферической камеры с разделенными полостями исследованы свойства квазиизэнтропически сжатой плазмы гелия при степенях сжатия в 600 [4] и 900 [5] раз. В работе [5] исследована также ударно-волновая сжимаемость гелия до $P \approx 83 \text{ ГПа}$. В эксперименте [6], используя для нагружения блок ВВ с массой $M \approx 85 \text{ кг}$ ТНТ, неидеальная плазма гелия сжата до плотности $\rho \approx 9 \text{ г/см}^3$ давлением $P \approx 10000 \text{ ГПа}$, а в работе [7] – до плотности $\rho \approx 13 \text{ г/см}^3$ давлением $P \approx 16700 \text{ ГПа}$. Квазиизэнтропическое сжатие плотного газообразного гелия исследовалось также в [8] в области давлений до 500 ГПа и до 2000 ГПа в [9].

¹⁾e-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

В недавно выполненной работе [10] экспериментально исследована сжимаемость гелия в диапазоне давлений 200–600 ГПа при постоянной конечной температуре $T \approx 21000$ К.

В настоящей работе предложена новая конструкция сферического двухкаскадного экспериментального устройства с оболочкой внутреннего каскада из сплава ВНЖ-95 и проведен эксперимент по исследованию сжимаемости гелия давлением $P \approx 20$ ТПа. Выполнен одномерный газодинамический расчет предложенного устройства; проведена оценка термодинамических параметров гелия, достигнутых с предложенным устройством.

Для регистрации сжатия гелия использован рентгенографический комплекс ВНИИЭФ, состоящий из бетатронов БИМ234.3000 [11], работающих в мультиимпульсном режиме генерации тормозного излучения и многоканальной оптико-электронной системы регистрации рентгеновских изображений, одновременно с высокопоточным ускорителем ЛИУ-Р-Т [12].

2. Экспериментальное устройство. Техника эксперимента. Основу устройства составляет заполненная гелием сферическая камера (см. рис. 1), изготовленная из высокопрочной стали методом пай-

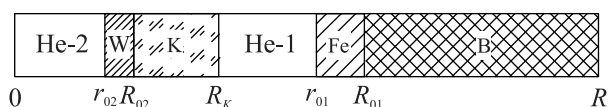


Рис. 1. Геометрия экспериментального устройства для исследования сжимаемости неидеальной плазмы гелия давлением 20 ТПа. Область: He-1, 2 – гелий; W – оболочка из сплава ВНЖ-95; К – капролоновая (полиамид-6) оболочка; В – взрывчатое вещество

ки. Для сжатия гелия использовано мощное конденсированное взрывчатое вещество (ВВ) (1) массой $m = 55$ кг ТНТ, внутри которого находится внешняя стальная оболочка (Fe), рассчитанная на давление газа $P = 200$ МПа. Основным элементом всей конструкции является комбинированный внутренний каскад, состоящий из сферической оболочки из капролона (полиамид-6) (К) и размещенной внутри тонкостенной оболочки (W) из сплава ВНЖ-95 (вольфрам-никель-железо в соотношении: W – 95 %, Ni – 3.5 %, Fe – 1.5 %).

Целью эксперимента является регистрация $R(t)$ траектории движения оболочки экспериментального устройства и определение ее размера в момент “остановки”, когда достигается максимальное сжатие исследуемого вещества, т.е. – измеряемой в эксперименте величиной является средняя плотность сжатой

плазмы гелия. При сохранении массы сжатого вещества его плотность вычисляли из выражения:

$$\rho = \rho_0(R_0/R_{\min})^n,$$

где ρ_0 – начальная плотность газа, R_0 и $R_{\min}$ – внутренний радиус оболочки в исходном состоянии и в момент ее “остановки” соответственно, $n = 3$ для сферической геометрии.

Для выбора режима рентгенографирования процесса сжатия гелия в эксперименте предварительно проведено тестирование нового устройства в начальной фазе его работы, когда влиянием газа можно пренебречь. Данные о динамике движения наружных и внутренних каскадов, использованные при выборе уравнений состояния элементов конструкции, получены в эксперименте с полусферическим макетом, моделирующим экспериментальное устройство. Макет (см. рис. 2) состоит из нагружающего устрой-

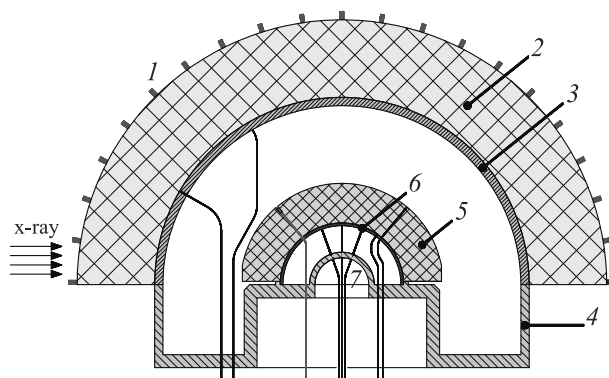


Рис. 2. (Цветной онлайн) Общий вид полусферического устройства: 1 – точки иницирования электродетонатора; 2 – ВВ; 3 – стальная оболочка (Fe); 4 – корпус; 5 – капролоновая оболочка (K); 6 – оболочка из ВНЖ-95 (W); 7 – измерительный приемник, черные линии – ЭКД, красная линия – PDV-датчик

ства (2) и полусферической камеры (3) из стали, вклеенной в стальной корпус (4), на котором размещены полусферическая оболочка из капролона (5) с оболочкой из ВНЖ 95 (6) и измерительный приемник с электроконтактными датчиками (7).

В эксперименте регистрировали: 1) времена выхода ударной волны (УВ) на внешнюю (t_1) и внутреннюю (t_2) границу оболочки (3) с использованием электроконтактных датчиков (ЭКД) (12 датчиков на наружной поверхности оболочки и 12 на внутренней); 2) времена выхода УВ на границы капролоновой оболочки (5) (8 ЭКД на наружной поверхности оболочки (t_3) и 12 ЭКД на внутренней (t_4)); 3) времена выхода УВ на внутреннюю границу ВНЖ-оболочки (ВГО) (t_5) (12 ЭКД); 4) скорость движения

оболочки (3) с использованием PDV-датчиков (4 датчика); 5) методом импульсной рентгенографии движение оболочек (3) и (6) на три момента времени.

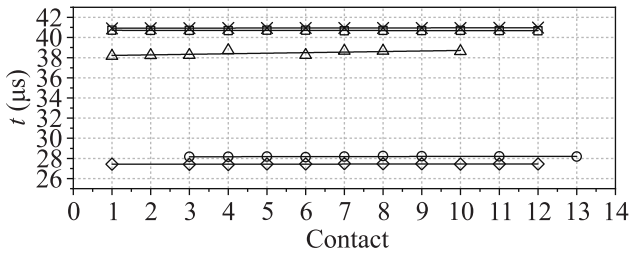


Рис. 3. Время движения ударной волны по оболочкам: $\diamond$ – $t_1 = (27.44 \pm 0.05)$ мкс, $\circ$ – $t_2 = (28.19 \pm 0.05)$ мкс, $\triangle$ – $t_3 = (38.45 \pm 0.29)$ мкс, $\square$ – $t_4 = (40.69 \pm 0.03)$ мкс, $\times$ – $t_5 = (40.95 \pm 0.03)$ мкс

Данные с электроконтактных датчиков, регистрирующих приход УВ на границы оболочек 3, 5 и 6, указывающие на хорошую симметрию движения ударной волны, показаны на рис. 3, там же сплошными линиями обозначены усредненные значения. Времена отсчитывали от прихода инициирующего импульса на электродетонатор (ЭД) (1).

Регистрацию скорости движения стальной оболочки (3) осуществляли с помощью аппаратного комплекса [13] на основе методики лазерно-оптического интерферометра [14]. Диаграммы скорости движения оболочки (3) по данным с четырех PDV-датчиков приведены на рис. 4. Все диаграммы практически совпали. Макси-

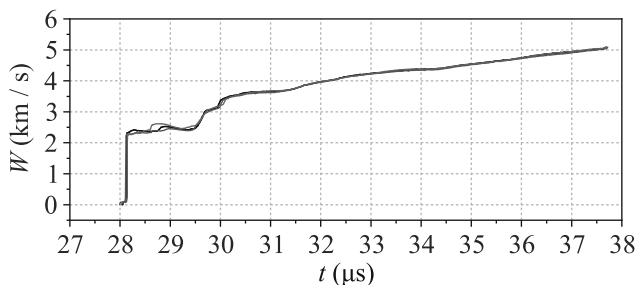


Рис. 4. (Цветной онлайн) Диаграммы (4 трека) скорости ВГО стальной оболочки экспериментального устройства (PDV-датчики)

мальная скорость стальной оболочки составила $V = (5.0 \pm 0.02)$ км/с. В результате усреднения сигналов с PDV-датчиков вычислено время начала движения стальной оболочки ($r_{01} = 97.1$ мм) – $t_0 = 28.041$ мкс и рассчитана $R(t)$ -траектория ее движения (см. ниже). Амплитудная и временная погрешности регистрации аппаратным комплексом [13] составляют 20 м/с и 10 нс соответственно.

Как и в работе [7], методом импульсной рентгенографии зарегистрировано положение стальной и вольфрамовой оболочек на три момента времени. Типичная рентгенограмма положения стальной и вольфрамовой оболочек на один из моментов времени движения $t_\gamma = 41.61$ мкс показана на рис. 5. Для регистрации изображения оболочек использова-

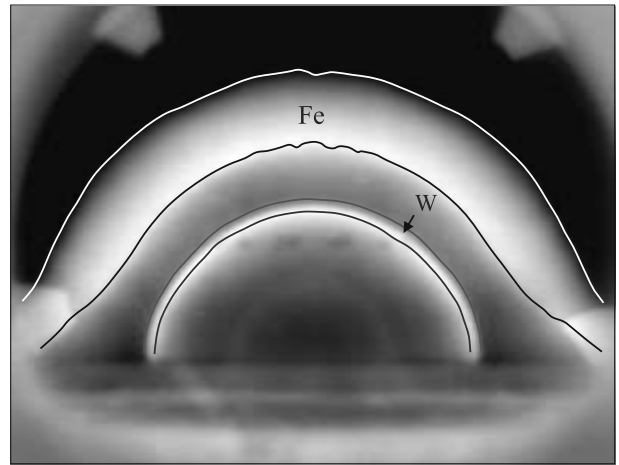


Рис. 5. (Цветной онлайн) Рентгенограмма оболочек (W) и (Fe) (см. рис. 1) в эксперименте и результаты трассировки их границ. Результаты функциональной трассировки: наружная граница стальной оболочки (НГО) – белая линия, ВГО из стали – черная, НГО из ВНЖ-95 – красная, ВГО из ВНЖ-95 – синяя

ли пакеты из 10 фотохромных ADC-экранов на основе галогенида бария, активированного европием. Для увеличения квантовой эффективности регистрации экраны были проложены свинцовыми пластинами толщиной ≈ 1 мм. На том же рисунке применен функциональный метод трассировки контуров оболочек, описанный в работе [15]. Суть данного метода заключается в экс-траполяции приграничных функций, лежащих слева и справа от границы, с целью нахождения точки их пересечения, которая и принимается за координату границы. Сводные данные по радиусам границ приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты трассировки границ оболочек (W) и (Fe) (см. рис. 1)

t , мкс	r_{02} , мм	R_{02} , мм	r_{01} , мм	R_{01} , мм
41.62	29.47	31.91	42.56	56.91
42.81	20.20	24.86	39.05	54.62
43.60	11.38	19.00	36.67	53.65

3. Квазиизэнтропическая сжимаемость гелия. Данные, полученные на этапе предварительного эксперимента с полусферическим макетом, были

использованы при выборе времен регистрации полостей в опыте по измерению сжимаемости плазмы гелия. Схема эксперимента приведена на рис. 6. Экс-

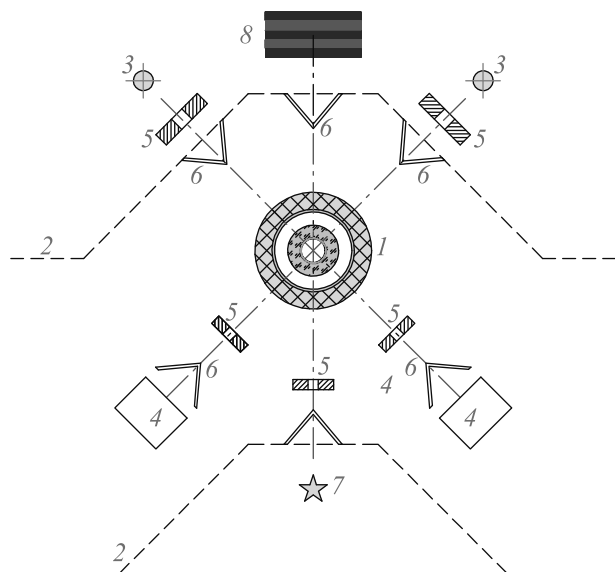


Рис. 6. (Цветной онлайн) Схема эксперимента: 1 – экспериментальное устройство; 2 – защитные сооружения; 3 – источники излучения (бетатроны); 4 – детекторы; 5 – коллиматоры (свинец); 6 – конусы (алюминий); 7 – линейный сильноточный ускоритель ЛИУ-Р-Т; 8 – набор фотохромных экранов

периментальное устройство (1) размещается между двумя бетонными сооружениями (2), в которых находятся источники рентгеновского излучения. В эксперименте использованы два импульсных бетатрона (3) БИМ234.3000 [11], работающие в режиме последовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения, и линейный индукционный ускоритель ЛИУ-Р-Т (7) (см. рис. 6). Использование ЛИУ-Р-Т, который по своим техническим характеристикам в оптимальном режиме позволяет просвечивать объекты с массовой толщиной до 300 г/см^2 , связано с ожидаемо высокой плотностью сжатой плазмы гелия в эксперименте $\rho \approx 15 \text{ г/см}^3$. В качестве регистратора рентгеновского излучения ЛИУ-Р-Т использован пакет из 10 фотохромных экранов (8).

Для заполнения камеры гелием использовали термокомпрессор. Величина давления газов в процессе заполнения измерялась датчиком с классом точности 0.25. Начальная температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газа. Для определения начальной плотности гелия использовали табличные данные

[16]. Семь экспериментальных рентгенограмм, зарегистрированных в опыте, приведены на рис. 7 и демонстрируют высокую симметрию сжатых полостей с плазмой гелия.

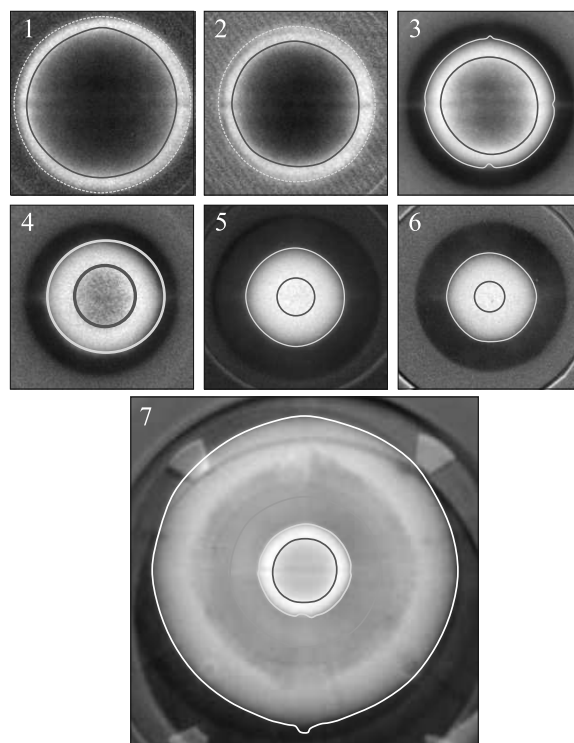


Рис. 7. (Цветной онлайн) Экспериментальные рентгенограммы: 1 – $t = 43.00 \text{ мкс}$; 2 – $t = 43.38 \text{ мкс}$; 3 – $t = 43.78 \text{ мкс}$; 4 – $t = 44.12 \text{ мкс}$; 5 – $t = 44.44 \text{ мкс}$; 6 – $t = 44.80 \text{ мкс}$; 7 – $t = 44.88 \text{ мкс}$

Для трассировки контуров сферических оболочек применен функциональный метод. Результаты трассировки границ оболочек приведены на рис. 7. Характеристика устройства, условия проведения опыта и полученные данные приведены в табл. 2.

Таблица 2. Характеристика устройства (см. рис. 1) и результаты опыта. Параметры гелия в исходном состоянии: ρ_0 , P_0 , T_0 – начальные плотность, давление, температура газа. Начальное давление гелия в обеих полостях одинаково. Параметры гелия при максимальном сжатии: $R_{\min}$ – радиус остановки устройства; ρ_{exp} , P_{calc} , T_{calc} – средневзвешенные расчетные плотность, давление и температура

r_{02} , см	P_0 , ГПа	ρ_0 , г/см ³	T_0 , К
3.2	0.0197	0.0292	296.5
$R_{\min}$, см	ρ_{exp} , г/см ³	P_{calc} , ГПа	T_{calc} , кК
0.410	13.9	19700	146

Экспериментальные $R(t)$ данные по сжимаемости плазмы гелия приведены на рис. 8 вместе с результа-

тами, полученными из эксперимента при газодинамическом моделировании. На том же графике приведены и результаты газодинамического расчета.

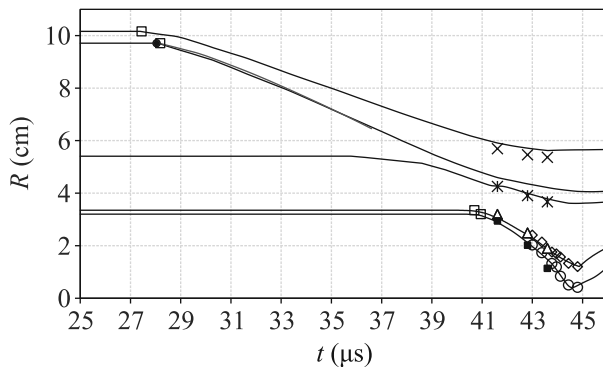


Рис. 8. (Цветной онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных движения границ элементов экспериментального устройства. Модельный эксперимент: $\square$ – данные ЭКД, $\bullet$ – данные с PDV-датчиков; данные рентгенографирования: $\times$ – НГО (Fe), $*$ – НГО (капролон), $\triangle$ – НГО (ВНЖ-95), $\blacksquare$ – ВГО (ВНЖ-95). Из основного эксперимента для ВНЖ-оболочки: $\circ$ – ВГО, $\diamond$ – НГО; красная сплошная линия – траектория движения ВГО для Fe-оболочки (PDV-датчики). Сплошные черные линии – газодинамический расчет

Из графика на рис. 8 видно, что газодинамические расчеты с использованием выбранной тактики счета хорошо описывают все контрольные точки (p_1, p_2, p_3) движения УВ по стальной оболочке первого каскада (Fe1), приход УВ на ВНЖ-оболочку, а также измеренные рентгенографическим методом значения границ оболочек экспериментального устройства. Данные расчета воспроизводят также динамику движения внутренней границы Fe-оболочки, зарегистрированную методом гетеродин-интерферометра из эксперимента настоящей работы с полусферическим макетом и положения границ ВНЖ-оболочки.

Расчеты траекторий движения оболочек, распределений плотности, давления и температуры по радиусу сжатой полости гелия выполнены по одномерной газодинамической программе [17], с учетом реальных термодинамических и прочностных свойств всех элементов экспериментального устройства и их уравнений состояния, введенных в расчетный комплекс ВНИИЭФ, и неоднократно представленных в работах [1–10]. Полученный в данной работе результат в координатах P – ρ приведен на рис. 9 вместе с другими данными ВНИИЭФ.

В результате проведенного эксперимента зарегистрирован минимальный радиус сжатой полости с

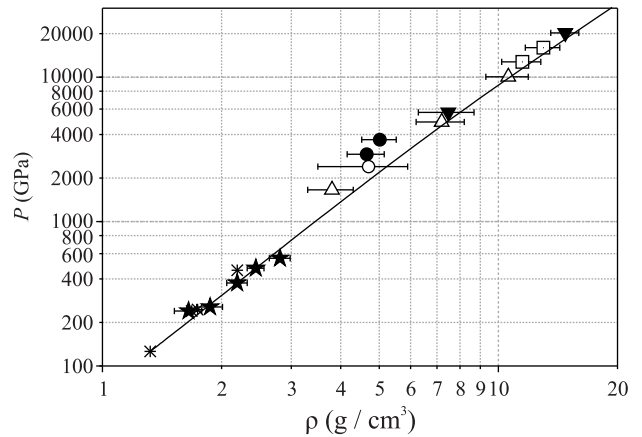


Рис. 9. Квазиизэнтропическая сжимаемость плазмы гелия в области давлений до 20 ТПа. Эксперимент: $\blacktriangledown$ – настоящая работа; $\triangle$ – [1, 3, 6]; $\bullet$ – [4]; $\circ$ – [9]; $\square$ – [7]; $*$ – [8]; $\star$ – [10]. Сплошная черная линия – изэнтропа $S/R = 16$

плазмой гелия $R_{\min} = 0.410$ см в момент времени $t_{\text{stop}} = 44.8$ мкс. Измеренный радиус отличается от рассчитанного $R_{\text{calc}} = 0.407$ см на момент “остановки” на 1.22 %. Экспериментальному радиусу сжатой полости с плазмой гелия $R_{\min} = 0.410$ см соответствует плотность гелия $\rho_{\text{exp}} = 13.9$ г/см³, которая на 7 % отличается от рассчитанного значения $\rho_{\text{calc}} = 14.34$ г/см³. Рассчитанное на момент максимального сжатия давление в плазме сжатого гелия имеет значение $P_{\text{calc}} = 19700$ ГПа при температуре $T = 146$ кК. Основным критерием истинности получаемого в расчетах давления можно считать удовлетворительное описание всех $R(t)$ траекторий движения оболочек экспериментальных устройств, что имеет место в настоящей работе.

Закключение. В данной работе представлен результат исследования сжимаемости гелия, полученный с использованием комбинированной сферической оболочки с контрастирующим слоем из сплава ВНЖ-95. Проведено газодинамическое исследование предложенной конструкции на макете с целью получения данных о динамике движения наружных и внутренних границ каскадов устройства для подбора моделей расчета конструкции и дальнейшего использования подобных оболочек в экспериментах с другими газами в мегабарной области давлений.

В результате исследований, проведенных в данной работе, плазма гелия была сжата до плотности $\rho_{\text{exp}} = 13.9$ г/см³ давлением $P \approx 20$ ТПа при температуре $T = 146000$ К, что, на данный момент времени, является рекордным достижением.

Авторы выражают благодарность сотрудникам, принявшим участие в организации, проведении

экспериментов и обработке полученных результатов: Е. В. Кулакову, А. С. Пупкову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. И. Гуркину, М. В. Логинову, Д. А. Линяеву, Г. С. Яндубаеву, В. В. Ерастову, В. В. Ковалдову, С. А. Финюшину, Е. А. Чудакову.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Госкорпорации “Росатом” по программе РТТН (проект “Исследование теплофизических свойств веществ при сжатии до рекордно высоких давлений и магнитных полей”) и в рамках научной программы Национального центра физики и математики по Государственному контракту # Н.4ц.241.4Д.23.1085.

1. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, ЖЭТФ **142**, 696 (2012).
2. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **96**, 172 (2012).
3. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др. (Collaboration), ЖЭТФ **146**, 169 (2014).
4. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **101**, 575 (2015).
5. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, С. Е. Елфимов, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
6. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
7. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др. (Collaboration), ЖЭТФ **160**, 735 (2021).
8. М. В. Жерноклетов, В. К. Грязнов, В. А. Аринин, В. Н. Бузин, Н. Б. Давыдов, Р. И. Ильяев, И. Л. Иосилевский, А. Л. Михайлов, М. Г. Новиков, В. В. Хрусталев, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ **96**, 479 (2012).
9. М. В. Жерноклетов, В. А. Раевский, С. Ф. Маначкин, Н. Б. Давыдов, К. Н. Панов, А. В. Рыжков, В. А. Аринин, Б. И. Ткаченко, А. И. Логвинов, В. А. Комраков, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, ФГВ **5**, 13 (2018).
10. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др. (Collaboration), ЖЭТФ **163**, 439 (2023).
11. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov et al. (Collaboration), in *11th IEEE Pulsed Power Conf., Digest of Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky, Baltimor, Maryland, USA (1997), p. 1669.
12. В. Ф. Басманов, В. С. Гордеев, А. В. Гришин, Н. В. Завьялов, Г. А. Мысков, С. Т. Назаренко, Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ **20**, 172 (2015).
13. Е. А. Чудаков, А. В. Федоров, С. А. Финюшин, Д. А. Калашников, И. С. Гнутов, И. В. Шмелев, Л. К. Антонюк, Патент # 2657135 РФ МПК G01P 3/36. Заявлено 27.07.2017. Опубликовано 08.06.2018. Бюлл. # 16.
14. O. T. Strand, D. R. Goosman, C. Martinez, T. L. Whitworth, and W. W. Kuhlow, Rev. Sci. Instrum. **77**, 083108 (2006).
15. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recognition and Image Analysis **19**, 63 (2009).
16. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, ГСССД, Изд-во стандартов, М. (1984).
17. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, Сер.: Методики и программы, численные решения задач математической физики **3**, 11 (1982).

Пространственно неоднородное сверхбыстрое размагничивание никелевого магнитоплазмонного кристалла

И. А. Новиков, М. А. Кирьянов, А. Ю. Фролов, В. В. Попов, Т. В. Долгова, А. А. Федянин¹⁾

Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 августа 2023 г.

После переработки 8 сентября 2023 г.

Принята к публикации 11 сентября 2023 г.

В эксперименте по субпикосекундному лазерному размагничиванию одномерного полностью никелевого магнитоплазмонного кристалла наблюдается уменьшение величины сверхбыстрого магнитооптического эффекта Керра на 50 % при плотности энергии размагничивающего фемтосекундного импульса, сравнимой с величиной, необходимой для достижения аналогичных значений в тонких пленках. Расчеты показывают, что такое уменьшение не соответствует снижению намагниченности всей поверхности на 50 %, а является результатом появления размагниченных и не размагниченных участков поверхности.

DOI: 10.31857/S1234567823200065, EDN: orgvnk

Экспериментальные исследования сверхбыстрого лазерного размагничивания начались с пионерской работы по наблюдению нестационарного магнитооптического эффекта Керра в тонкой пленке никеля под действием фемтосекундного лазерного импульса [1]. Оказалось, что характерное время изменения намагниченности заметно меньше периода прецессии магнитных моментов. На протяжении почти трех десятков лет для описания этого явления выдвигались различные концепции, такие как трехтемпературная модель и расширения двухтемпературной модели [1–3], механизм Эллиота–Яфета [4–6], уравнение Ландау–Лифшица–Блоха [7], теория функционала плотности с временным разрешением [8–10]. Модели предсказывают близкие значения времен размагничивания, но расходятся в оценке значений необходимой плотности энергии. Более того, экспериментальные [11, 12] и теоретические [13, 14] исследования показали, что степень размагничивания металлических пленок существенно зависит от их толщины.

Наноразмерные системы поддерживают возбуждение различных электромагнитных мод, позволяющих концентрировать электромагнитное излучение. Примерами таких мод являются ми-резонансы [15, 16], связанные состояния в континууме [17, 18], волноводные моды [19], блоховские поверхностные волны [20], таммовские [21], локализованные [22, 23] и решеточные [24, 25] плазмоны, поверхностные плазмон-поляритоны [26–28]. Концентрация электромагнитного излучения позволяет повысить эф-

фективность оптического нагрева [29, 30], приводит к усилению нелинейно-оптических [31] и магнитооптических [32–34] явлений, а в экспериментах по сверхбыстрому лазерному размагничиванию позволяет снизить пороговые значения энергии импульса накачки [35, 36], а также повысить чувствительность методов детектирования [37]. Однако, наноструктурирование приводит к появлению дополнительных сверхбыстрых процессов и связанных с ними характерных времен. Было показано, что требуется учитывать плазмон-индуцированные межзонные переходы [38], процессы электронной диффузии при неоднородном нагреве [39], термоакустические явления [40, 41], низкоразмерные эффекты [42]. Подобные особенности также могут влиять на результаты исследования сверхбыстрой динамики магнитных процессов в наноструктурированных пленках ферромагнетиков.

В данной статье экспериментально показано, что в объемном никеле с субволновой модуляцией профиля поверхности сверхбыстрый магнитооптический эффект Керра уменьшается на 50 % на субпикосекундном временном масштабе при плотности энергии размагничивающего импульса, сравнимой с величиной, необходимой для достижения аналогичных значений в тонких пленках. Численно продемонстрировано, что такое уменьшение не соответствует снижению намагниченности всей поверхности никеля, а является результатом появления периодических размагниченных и не размагниченных участков поверхности.

Исследуемый одномерный магнитоплазмонный кристалл (МПК) представляет собой никелевую

¹⁾e-mail: fedyanin@nanolab.phys.msu.ru

пластину толщиной 500 мкм с поверхностью волнообразной формы. Образец был изготовлен методами электронно-лучевой литографии и гальванопластики. Сначала на стеклянную подложку наносился 500-нм слой негативного фоторезиста, который затем экспонировался электронным пучком для создания периодической структуры. После чего резист проявлялся, а на получившийся рельеф напылялся тонкий проводящий слой серебра (~50 нм). На поверхности получившейся маски методом гальванопластики наращивался слой никеля толщиной 500 мкм. Далее получившаяся структура механически отделялась от поверхности фоторезиста, слой серебра удалялся химически.

Характеризация магнитоплазмонного кристалла проводилась на атомно-силовом и сканирующем электронном микроскопах. Было получено, что форма поверхности образца близка к синусоидальной, амплитуда первой пространственной гармоники составляет 45 нм, что соответствует глубине модуляции поверхности 90 нм, амплитуды второй и последующих пространственных гармоник не превышают 1–2 нм. Пространственный период образца составляет 503 ± 2 нм. Образец был ранее детально исследован оптическими и магнитооптическими методами в работе [32]. Было получено, что в нем поддерживается возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов минус первого порядка для широкого диапазона углов падения излучения в видимом спектральном диапазоне. Пространственная конфигурация образца соответствует условию критического связывания ($\Gamma_{abs} = \Gamma_{rad}$) [30, 32]. В спектре коэффициента отражения наблюдается резонанс типа Фано с близким к нулю значением в минимуме. Значение экваториального магнитооптического эффекта Керра (ЭМОЭК) в исследуемом образце в области резонанса доходит до $2.4 \cdot 10^{-2}$, что соответствует 77-кратному усилению по сравнению с неструктурированной пленкой. В работе [37] в рассматриваемом никелевом МПК проводилось исследование сверхбыстрых процессов, вызванных лазерным нагревом импульсом с длиной волны 800 нм, плотностью энергии 7 мДж/см^2 на длине волны зонда 645 нм, лежащей в окрестности минимума плазмонного резонанса. Было обнаружено изменение коэффициента отражения образца на 6 % и снижение абсолютного значения ЭМОЭК в нем на 65% с $1.2 \cdot 10^{-2}$ до $4 \cdot 10^{-3}$.

В данной работе исследование сверхбыстрого лазерного размагничивания никелевого магнитоплазмонного кристалла проведено в схеме фемтосекундной спектроскопии с временным разрешением “зонд-

накачка”. В качестве источника излучения использовался титан-сапфировый фемтосекундный лазер с регенеративным усилителем Coherent Libra с центральной длиной волны 800 нм, длительностью импульса 70 фс и частотой повторения 1 кГц. Импульс на светоделительной пластинке разделялся на два, один из которых под нормалью падал на образец, нагревая его (импульс накачки). Для этой длины волны при нормальном падении поверхностный плазмон не возбуждается. Второй пучок генерировал суперконтинуум в кристалле сапфира в спектральном диапазоне от 500 до 1400 нм, который в дальнейшем падал на образец под углом 12° и использовался для зондирования. Для данного угла падения длина волны возбуждения поверхностных плазмонов в исследуемом образце составляет 620 нм [32]. В плече зондирования излучение с длиной волны больше 750 нм обрезалось коротковолновым фотонно-кристаллическим фильтром. Плотность энергии излучения пучка накачки на поверхности образца составляла 6 мДж/см^2 и порядка 1 нДж/см^2 для пучка зондирования, диаметры пучков – 700 и 400 мкм, соответственно. Насыщающее магнитное поле величиной 500 Гс прикладывалось к образцу перпендикулярно плоскости падения излучения в экваториальной геометрии.

В эксперименте измерялся магнитооптический контраст $\Delta\delta$, определяемый как разность значений эффекта Керра под действием и в отсутствии накачки:

$$\Delta\delta(\tau) = \delta_{\text{pump}}(\tau) - \delta_{\text{no pump}}, \quad (1)$$

где τ – время задержки между импульсами накачки и зонда. Для нахождения значений δ использовалось выражение:

$$\delta = 2 \frac{R(H) - R(-H)}{R(H) + R(-H)}. \quad (2)$$

Экспериментальные спектры магнитооптического контраста магнитоплазмонного кристалла для различных времен задержки между импульсами накачки и зонда представлены на верхней части рис. 1. Наиболее существенное изменение $\Delta\delta$ наблюдается в спектральной области от 600 до 640 нм, соответствующей области плазмонного резонанса. Модуляция эффекта Керра достигает максимума на временной задержке $\tau = 500$ фс, соответствующей времени размагничивания никеля [1]. Спектр магнитооптического контраста $\Delta\delta$ для данной временной задержки представлен на нижней части рис. 1 вместе со спектрами эффекта Керра δ_{pump} (синие точки) и $\delta_{\text{no pump}}$ (синяя кривая). Под действием лазерного нагрева происходит сдвиг резонанса в спектре

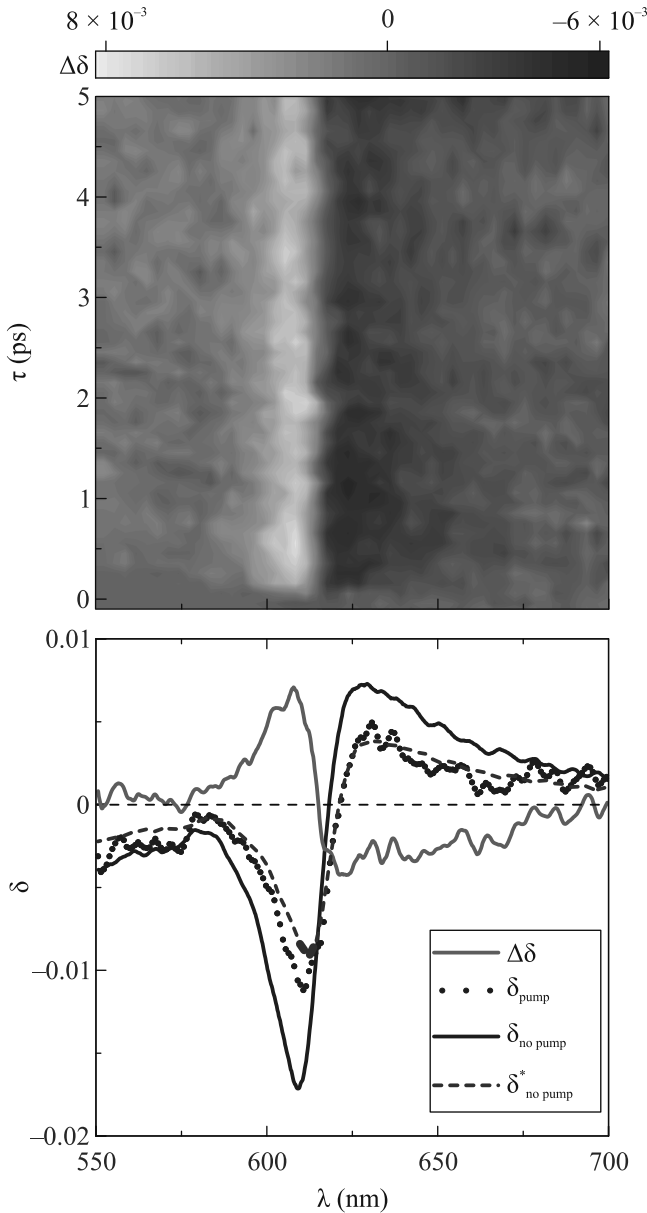


Рис. 1. (Цветной онлайн) Верхний рисунок: зависимость магнитооптического контраста $\Delta\delta$ исследуемого образца от времени задержки τ между импульсами и от длины волны λ зондирующего импульса. Нижний рисунок: спектр магнитооптического контраста (серая кривая) исследуемого образца при временной задержке $\tau = 500$ фс. Также представлены спектры ЭМОЭК при отсутствии $\delta_{\text{no pump}}$ (синяя кривая) и под действием (синие точки) δ_{pump} накачки. Описание кривой, показанной фиолетовой прерывистой линией, приводится в основном тексте

ЭМОЭК на 3 нм и уменьшение его абсолютных значений в два раза. Это может быть обусловлено двумя факторами – сверхбыстрым размагничиванием никеля и изменением волнового вектора поверхностного плазмона k_{SPR} . Изменение его действительной ча-

сти ($\Delta k'_{SPR} \neq 0$) должно приводить к сдвигу плазмонного резонанса, а мнимой части ($\Delta k''_{SPR} \neq 0$) – к изменению его добротности. Однако под действием излучения накачки уширения спектра ЭМОЭК не наблюдается, модификация волнового вектора поверхностного плазмона сводится к изменению его действительной части. Компенсировав соответствующий сдвиг плазмонного резонанса, можно получить вклад от размагничивания: если сдвинуть кривую $\delta_{\text{no pump}}$ на величину 3 нм в длинноволновую область и уменьшить ее абсолютные значения в 2 раза, то полученная кривая $\delta^*_{\text{no pump}}$ (показана фиолетовой пунктирной кривой на нижней части рис. 1) практически совпадает с δ_{pump} . Таким образом, лазерное размагничивание 70-фс импульсом с длиной волны 800 нм и плотностью энергии 6 мДж/см² вызывает 50 % уменьшение абсолютных значений ЭМОЭК в окрестности плазмонного резонанса.

Наблюдаемое в эксперименте уменьшение величины ЭМОЭК в объемном образце при данной плотности энергии импульса накачки характерно для тонких никелевых пленок толщиной 15–20 нм [1, 11, 43]. Однако известно, что объемные образцы размагничиваются слабее пленок [44]. В работе [45] было показано, что для 65 % размагничивания объемного никеля требуется плотность энергии, сравнимая с порогом плавления. Эта особенность может быть связана с пространственной неоднородностью рельефа образца, которая влияет на пространственное распределение областей нагрева и зондирования. Для исследования этого вопроса были проведены расчеты оптического поглощения импульса накачки и динамики распределения температуры в образце с помощью двухтемпературной модели.

Расчеты стационарного распределения электрической компоненты ближнего поля в исследуемом образце и поглощенной им энергии на длинах волн накачки (800 нм) и зондирования (617 нм) проводились в программном пакете Comsol Multiphysics. Геометрия образца (пространственный период, глубина модуляции), а также условия эксперимента (углы падения соответствующих пучков, поляризация, плотность энергии источника) воспроизводились в модели. Расчет температурной динамики проводился в рамках двухтемпературной модели [46] – системы дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа, описывающей процессы теплообмена между электронами и фононами в металле:

$$\begin{cases} \gamma T_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla (K_e \nabla T_e) - g(T_e - T_l) + S(r, t) \\ C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \nabla (K_l \nabla T_l) + g(T_e - T_l), \end{cases} \quad (3)$$

где γT_e и C_l – теплоемкости электронной и фоновой подсистем, K_e и K_l – теплопроводность электронного газа и решетки, соответственно, g – коэффициент связывания, характеризующий передачу энергии от нагретых электронов фононам решетки, $S(r, t)$ – член, характеризующий источник нагрева. Пространственный профиль $S(r, t)$ соответствовал рассчитанной поглощенной энергии на длине волны 800 нм, а временная зависимость повторяла огибающую импульса накачки. Система уравнений (3) позволяет найти электронную T_e и решеточную T_l температуры в различные моменты времени в разных точках пространства. Константы γ , K_e , g , C_l , K_l были подобраны так, чтобы наилучшим образом аппроксимировать полученные в работе [37] временные зависимости дифференциального отражения. Для численного решения системы (3) также использовался программный пакет Comsol Multiphysics.

Полученное распределение температуры электронного газа в образце на задержке $\tau = 500$ фс, соответствующей времени достижения максимума T_e , показано на верхней части рис. 2. Видно, что исследуемый магнитоплазменный кристалл нагревается неравномерно: тепло локализуется в канавках

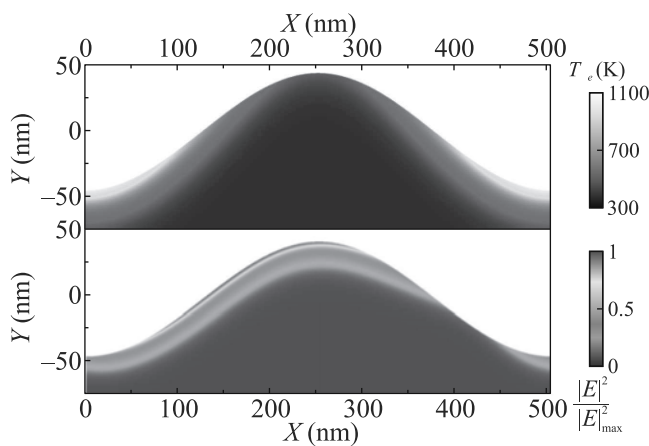


Рис. 2. (Цветной онлайн) Верхняя панель: рассчитанное в рамках двухтемпературной модели распределение электронных температур на одном периоде образца спустя $\tau = 500$ фс после прихода импульса накачки (800 нм). Нижняя панель: распределение квадрата электрической компоненты ближнего поля зондирующего импульса в образце на длине волны возбуждения поверхностного плазмона (617 нм), нормированное на максимум

решетки, в то время как ее вершины остаются холодными. Температура в более нагретых областях оказывается выше, чем в тонких пленках при соизмеримой по величине плотности энергии импульса

накачки [1], однако температура в более холодных областях (вершинах) будет ниже. В силу того, что размагничивание следует за температурой, можно утверждать, что в отличие от гладкой пленки в случае решетки образуется неравномерный профиль намагниченности. В этом случае важную роль начинает играть пространственное распределение ближнего поля импульса зондирования, определяемое локализацией поверхностного плазмона и представленное на нижней части рис. 2 для длины волны плазмонного возбуждения. Область зондирования лишь частично перекрывается с областью повышенного нагрева. Это и приводит к снижению эффекта Керра на 50 %, что сопоставимо по величине с эффектом в тонких пленках при близких значениях плотности энергии [1, 11, 43].

В заключение, в работе наблюдается сверхбыстрое уменьшение экваториального магнитооптического эффекта Керра на 50 % в спектральном диапазоне возбуждения поверхностных плазмонов в полностью никелевом магнитоплазменном кристалле при плотности энергии размагничивающего фемтосекундного импульса 6 мДж/см². Исходя из литературных данных, такие значения для объемных образцов ожидалось при плотностях энергии в несколько раз больше [8, 45]. Для объяснения этой особенности были проведены расчеты пространственных распределений ближнего поля зондирующего импульса и электронной температуры в образце. Наблюдаемое уменьшение ЭМОЭК объясняется не снижением намагниченности всей поверхности на 50 %, а ее пространственно неоднородным нагревом. Канавки решетки нагреваются сильнее поверхности тонких плоских пленок в аналогичных условиях. В результате размагничивается только часть поверхности образца. Таким образом, в наноструктурированных системах макроскопический сверхбыстрый магнитооптический отклик связан с намагниченностью сложным образом и требует дополнительной интерпретации в каждом случае.

И. А. Новиков и М. А. Кирьянов являются стипендиатами Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”. Для характеристики образцов использовалось оборудование, предоставленное по Программе развития МГУ (соглашение # 102 от 14.02.2022).

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 22-22-00856.

1. E. Beaurepaire, J.-C. Merle, A. Daunois, and J.-Y. Bigot, Phys. Rev. Lett. **76**, 4250 (1996).

2. M. Pankratova, I. P. Miranda, D. Thonig, M. Pereiro, E. Sjöqvist, A. Delin, O. Eriksson, and A. Bergman. *Phys. Rev. B* **106**, 174407 (2022).
3. B. Mueller and B. Rethfeld. *Phys. Rev. B* **90**, 144420 (2014).
4. B. Koopmans, J. J. M. Ruigrok, F. Dalla Longa, and W. J. M. de Jonge, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 267207 (2005).
5. K. Carva, M. Battiato, and P. M. Oppeneer, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 207201 (2011).
6. Z. Zheng, Q. Zheng, and J. Zhao. *Phys. Rev. B* **105**, 085142 (2022).
7. U. Atxitia and O. Chubykalo-Fesenko. *Phys. Rev. B* **84**, 144414 (2011).
8. K. Krieger, J. Dewhurst, P. Elliott, S. Sharma, and E. Gross, *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 4870 (2015).
9. S. R. Acharya, V. Turkowski, G. Zhang, and T. S. Rahman, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 017202 (2020).
10. H. Hamamera, F. S. M. Guimaraes, M. dos Santos Dias, and S. Lounis, *Commun. Phys.* **5**, 16 (2022).
11. A. Eschenlohr, M. Battiato, P. Maldonado, N. Pontius, T. Kachel, K. Holldack, R. Mitzner, A. Föhlisch, P. M. Oppeneer, and C. Stamm, *Nat. Mater.* **12**, 332 (2013).
12. G. Salvatella, R. Gort, K. Bühlmann, S. Däster, A. Vaterlaus, and Y. Acremann, *Struct. Dyn.* **3**, 055101 (2016).
13. K. Krieger, P. Elliott, T. Müller, N. Singh, J. Dewhurst, E. Gross, and S. Sharma, *J. Phys. Condens. Matter* **29**, 224001 (2017).
14. K. Kuiper, G. Malinowski, F. Dalla Longa, and B. Koopmans, *J. Appl. Phys.* **109**, 07D316 (2011).
15. Y. Kivshar, *Nano Lett.* **22**, 3513 (2022).
16. A. A. Popkova, I. M. Antropov, G. I. Tselikov, G. A. Ermolaev, I. Ozerov, R. V. Kirtaev, S. M. Novikov, A. B. Evlyukhin, A. V. Arsenin, V. O. Bessonov, V. S. Volkov, and A. A. Fedyanin, *Laser Photonics Rev.* **16**, 2100604 (2022).
17. Z. Sadrieva, K. Frizyuk, M. Petrov, Y. Kivshar, and A. Bogdanov, *Phys. Rev. B*, **100**, 115303 (2019).
18. А. М. Черняк, М. Г. Барсукова, А. С. Шорохов, А. И. Мусорин, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 40 (2020) [A. M. Chernyak, M. G. Barsukova, A. S. Shorokhov, A. I. Musorin, and A. A. Fedyanin, *JETP Lett.* **111**, 46 (2020)].
19. D. O. Ignatyeva, D. Karki, A. A. Voronov, M. A. Kozhaev, D. M. Krichevsky, A. I. Chernov, M. Levy, and V. I. Belotelov, *Nat. Commun.* **11**, 5487 (2020).
20. Д. А. Шилкин, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 157 (2022) [D. A. Shilkin and A. A. Fedyanin, *JETP Lett.* **115**, 136 (2022)].
21. B. I. Afnogenov, V. O. Bessonov, I. V. Soboleva, and A. A. Fedyanin, *ACS Photonics* **6**, 844 (2019).
22. K. A. Willets and R. P. van Duyne, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **58**, 267 (2007).
23. N. Maccaferri, A. Gabbiani, F. Pineider, T. Kaihara, T. Tapani, and P. Vavassori, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 120502 (2023).
24. V. G. Kravets, A. V. Kabashin, W. L. Barnes, and A. N. Grigorenko, *Chem. Rev.* **118**, 5912 (2018).
25. A. I. Musorin, A. V. Chetvertukhin, T. V. Dolgova, H. Uchida, M. Inoue, B. S. Luk'yanchuk, and A. A. Fedyanin, *Appl. Phys. Lett.* **115**, 151102 (2019).
26. W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, *Nature* **424**, 824 (2003).
27. M. R. Shcherbakov, P. P. Vabishchevich, A. Yu. Frolov, T. V. Dolgova, and A. A. Fedyanin, *Phys. Rev. B* **90**, 201405 (2014).
28. D. V. Murzin, A. Yu. Frolov, K. A. Mamian, V. K. Belyaev, A. A. Fedyanin, and V. V. Rodionova, *Opt. Mater. Express* **13**, 171 (2023).
29. A. N. Koya, M. Romanelli, J. Kuttruff et al. (Collaboration), *Appl. Phys. Rev.* **10**, 021318 (2023).
30. D. Ryabov, O. Pashina, G. Zograf, S. Makarov, and M. Petrov, *Nanophotonics* **11**, 3981 (2022).
31. G. Zograf, K. Koshelev, A. Zalogina, V. Korolev, R. Hollinger, D.-Y. Choi, M. Zuerch, C. Spielmann, B. Luther-Davies, D. Kartashov, S. V. Makarov, S. S. Kruk, and Y. Kivshar, *ACS Photonics* **9**, 567 (2022).
32. M. A. Kiryanov, A. Yu. Frolov, I. A. Novikov, P. A. Kipp, P. K. Nurgalieva, V. V. Popov, A. A. Ezhov, T. V. Dolgova, and A. A. Fedyanin, *APL Photonics* **7**, 026104 (2022).
33. V. K. Belyaev, V. V. Rodionova, A. A. Grunin, M. Inoue, and A. A. Fedyanin, *Sci. Rep.* **10**, 7133 (2020).
34. A. Yu. Frolov, M. R. Shcherbakov, and A. A. Fedyanin, *Phys. Rev. B* **101**, 045409 (2020).
35. M. Kataja, F. Freire Fernandez, J. Witteveen, T. Hakala, P. Törmä, and S. Dijken, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 072406 (2017).
36. H. Xu, G. Hajisalem, G. Steeves, R. Gordon, and B.-C. Choi, *Sci. Rep.* **5**, 15933 (2015).
37. I. A. Novikov, M. A. Kiryanov, P. K. Nurgalieva, A. Yu. Frolov, V. V. Popov, T. V. Dolgova, and A. A. Fedyanin, *Nano Lett.* **20**, 8615 (2020).
38. M. Taghinejad, H. Taghinejad, Z. Xu, K.-T. Lee, S. P. Rodrigues, J. Yan, A. Adibi, T. Lian, and W. Cai, *Nano Lett.* **18**, 5544 (2018).
39. A. Schirato, M. Maiuri, A. Toma, S. Fugattini, R. Proietti Zaccaria, P. Laporta, P. Nordlander, G. Cerullo, A. Alabastri, and G. Della Valle, *Nat. Photon.* **14**, 723 (2020).
40. G. V. Hartland, *Chem. Rev.* **111**, 3858 (2011).

41. М. А. Кирьянов, Г. С. Останин, Т. В. Долгова, М. Иноуэ, А. А. Федянин, Письма в ЖЭТФ **117**, 201 (2023) [M. A. Kiryanov, G. S. Ostanin, T. V. Dolgova, M. Inoue, and A. A. Fedyanin, JETP Lett. **117**, 196 (2023)].
42. C. Voisin, D. Christofilos, N. Del Fatti, F. Vallée, B. Prével, E. Cottancin, J. Lermé, M. Pellarin, and M. Broyer, Phys. Rev. Lett. **85**, 2200 (2000).
43. T. Roth, A. J. Schellekens, S. Alebrand, O. Schmitt, D. Steil, B. Koopmans, M. Cinchetti, and M. Aeschlimann, Phys. Rev. X **2**, 021006 (2012).
44. K. Krieger, P. Elliott, T. Müller, N. Singh, J. Dewhurst, E. Gross, and S. Sharma, J. Phys. Condens. Matter **29**, 224001 (2017).
45. U. Bierbrauer, S. T. Weber, D. Schummer, M. Barkowski, A.-K. Mahro, S. Mathias, H. C. Schneider, B. Stadtmüller, M. Aeschlimann, and B. Rethfeld, J. Phys., Condens. Matter **29**, 244002 (2017).
46. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).

Влияние концентрации Gd на сверхпроводящие свойства в ВТСП лентах 2-го поколения

П. Н. Дегтяренко⁺¹⁾, А. В. Садаков*, А. В. Овчаров[×], А. Ю. Дегтяренко*, С. Ю. Гаврилкин*,
О. А. Соболевский*, А. Ю. Цветков*, Б. И. Массалимов*

⁺Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

*Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга ФИАН, 119991 Москва, Россия

[×]Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 августа 2023 г.

После переработки 13 сентября 2023 г.

Принята к публикации 13 сентября 2023 г.

В данной работе представлены систематические исследования высокотемпературных сверхпроводящих лент 2-го поколения с избытком по Gd относительно стехиометрического состава пленок $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Выявлено, что при росте пленки образуются нитевидные дефекты в виде несверхпроводящей фазы Gd_2CuO_4 , расположенные вдоль плоскости ab . Эти включения приводят к изменению механизма пиннинга вихревой структуры, благодаря чему отчетливо наблюдается пик критического тока при +15 % Gd.

DOI: 10.31857/S1234567823200077, EDN: orhiig

1. Введение. За последнее время сверхпроводники (СП) продемонстрировали успешные результаты для крупномасштабного применения в установках ускорительной техники, термоядерной энергетики и медицины [1, 2]. Для достижения высоких и однородных магнитных полей в сверхпроводящих магнитных системах (СМС), критические токи должны быть не менее $I_c = 1000$ А в собственном поле. Такие результаты получены при разработке СМС на основе низкотемпературных сверхпроводников NbTi и Nb_3Sn [3]. К успешным применениям этих материалов можно отнести создание и модернизации СМС большого адронного коллайдера (БАК) [4, 5] и СМС японского ускорителя J-PARC [6], в термоядерной энергетике разработка и создание токамаков Tore Supra [7] и ITER [8].

Однако для перехода к более высоким значениям магнитных полей необходимо исследовать новые материалы. Одним из таких материалов являются высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) материалы с измененным составом на основе ReBCO (Re – редкоземельный элемент). Комбинации состава по Re элементу приводят к образованию различных типов дефектов, которые преимущественно определяют сверхпроводящие свойства [9]. Основным преимуществом этих сверхпроводников являются высо-

кие значения критической температуры $T_c \sim 94$ К и верхнего критического поля $H_{c2} \sim 100$ Тл [10]. Именно поэтому основным перспективным вариантом использования ВТСП сверхпроводников является производство на их основе ВТСП лент 2-го поколения для крупномасштабного применения [11].

Для использования в прикладных целях необходимо более детальное исследование их сверхпроводящих характеристик [12–14]. Повышение сверхпроводящих параметров, как правило, осуществляется за счет использования таких методов, как: добавление искусственных центров пиннинга (ИЦП) [15, 16], радиационное облучение [17–19] или изменение состава по редкоземельному элементу или его замена [20, 21]. Все они направлены на создание однородного распределения дефектов, которые являются центрами закрепления вихрей Абрикосова [22]. Оптимальная концентрация дефектов позволяет распределяться вихрям таким образом, чтобы в сверхпроводнике образовывалась вихревая решетка, способствующая повышению плотности критического тока. Более подробно изученными являются ВТСП ленты 2-го поколения на основе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO). Это связано с тем фактом, что температура сверхпроводящего перехода напрямую зависит от ионного радиуса редкоземельного элемента [23]. ВТСП ленты 2-го поколения на основе $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (GdBCO) ($\text{Gd}^{3+} = 0.105$ нм) в сравнении с YBCO ($\text{Y}^{3+} = 0.102$ нм),

¹⁾e-mail: degtyarenkopn@gmail.com

имеют более высокую температуру сверхпроводящего перехода $T_c \sim 93$ К, для YBCO $T_c = 88-89$ К, а также демонстрируют оптимальные характеристики при азотной температуре $T = 77$ К, $I_c = 1000$ А в собственном поле, $I_c = 400$ А при $B \parallel c = 6$ Тл [24].

Исходя из вышеописанного, целью настоящей работы являлось систематическое исследование влияния избытка Gd на сверхпроводящие свойства ВТСП лент 2-го поколения на основе пленок $Gd_{1+x}Ba_{2-y}Cu_3O_{7-\delta}$. Проведен микроструктурный анализ образцов, изготовлены микромостики для прямых токовых измерений и получены угловые зависимости критического тока в различных магнитных полях. Полученные результаты влияния избытка Gd на сверхпроводящие параметры внесут вклад в промышленную оптимизацию получения ВТСП лент 2-го поколения.

2. Экспериментальная часть. Для экспериментальных исследований были использованы образцы ВТСП лент 2-го поколения шириной 12 мм на основе GdBCO, полученные на производственном оборудовании с промышленными скоростями осаждения.

Сверхпроводящий слой напыляли на подложку из сплава Хастеллой С-276 с буферными подслоями $LaMnO_3$ /IBAD-MgO/ α - Y_2O_3 / α - Al_2O_3 . Для напыления сверхпроводящего слоя использовался метод импульсного лазерного осаждения (ИЛО). Распыление мишеней с различным избытком Gd относительно стехиометрического состава проводилось при помощи Хе-Сл эксимерного лазера с длиной волны $\lambda = 308$ нм и энергией импульса около 700 мДж. В зоне осаждения буферная лента-подложка нагревалась путем механического контакта с горячей пластиной из инконеля, температура которой составляла порядка 1000 °С. Скорость протяжки ленты-подложки варьировалась в диапазоне 45–60 м/ч [25]. После осаждения ВТСП пленки были защищены слоем напыленного серебра толщиной 2 мкм. Для получения оптимальных значений по содержанию кислорода был проведен отжиг в атмосфере чистого кислорода. В результате получали образцы ВТСП лент с избытком по Gd: +0 %, +15 %, +30 %, с толщиной СП пленки для каждого из образцов порядка 1.8 мкм.

Исследования методами электронной микроскопии проводили на просвечивающем (растровом) электронном микроскопе (П(Р)ЭМ) Titan 80-300, оснащенном корректором сферических аберраций пробы в режиме темного поля с использованием высокоуглового кольцевого детектора. Образцы для исследований получали методом сфокусиро-

ванного ионного пучка (ФИП) на сканирующем электронно-ионном микроскопе (РЭИМ) Helios Nanolab 600i.

Транспортные характеристики ВТСП лент 2-го поколения измерялись при помощи прямых сильно-точных измерений, а для измерений в сильных магнитных полях были изготовлены микромостики. Для этого с помощью лазерной резки из исходных образцов были вырезаны сначала мостики размером порядка 1000 на 40 мкм, а затем они уменьшались до размеров 150 мкм на 5 мкм с помощью ФИП на РЭИМ Helios Nanolab 660. Фотография одного из полученных микромостиков представлена на рис. 1. Измерения на микромостиках проводились на установке Cryogenic CFMS (Cryogen Free Measurement System) в полях до 16 Тл при различной ориентации внешнего магнитного поля по отношению к плоскости образца. Определение критического тока осуществлялось транспортным методом по критерию 1 мкВ/см. Температура сверхпроводящего перехода определялась из измеренных температурных зависимостей сопротивления на установке PPMS.

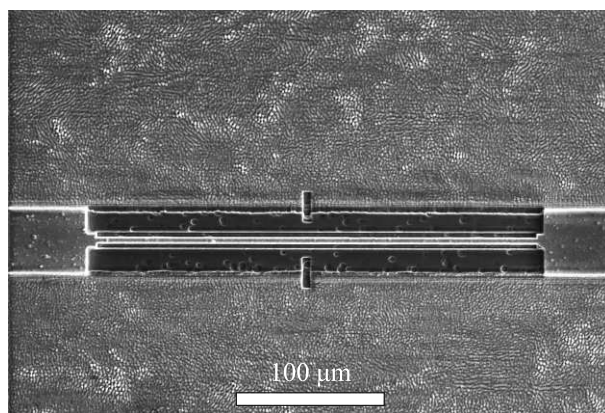


Рис. 1. Фотография мостика образца для измерений на установке CFMS

3. Результаты и обсуждение. На темнопольных ПРЭМ изображениях микроструктур (рис. 1а–с) с различным содержанием Gd (+0 %, +15 %, +30 %), наблюдаются включения в виде параллельных нитей (скопление точечных дефектов), расположенных вдоль плоскости ab . Согласно фазовой диаграмме, представленной в работе [26], эти включения могут являться несверхпроводящей фазой типа Gd_2CuO_4 , которая кристаллизуется в направлении $(00l)$.

Увеличение избытка Gd приводит к росту количества и характерного размера поперечного сечения этих включений, а также расстояния между ними.

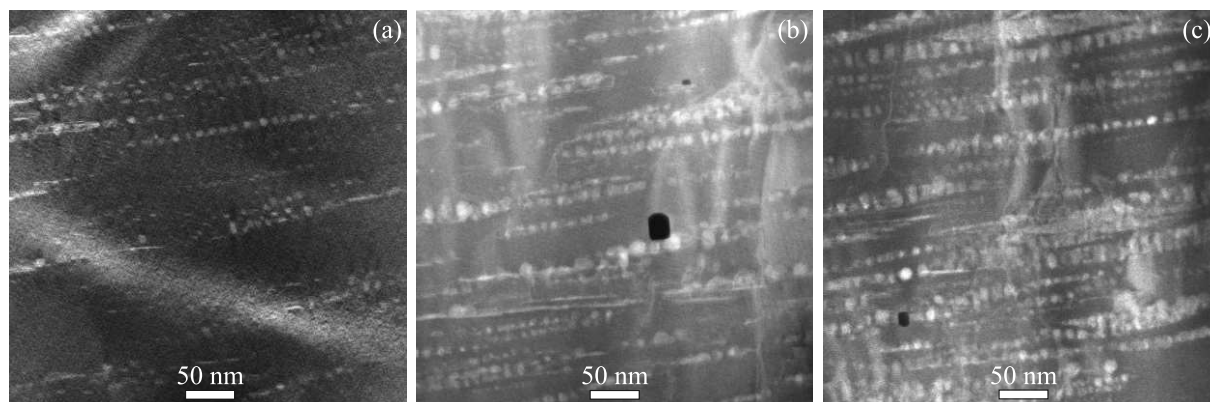


Рис. 2. Темнопольные ПРЭМ изображения микроструктур образцов с различной концентрацией избытка Gd: (a) – +0 %; (b) – +15 %; (c) – +30 %

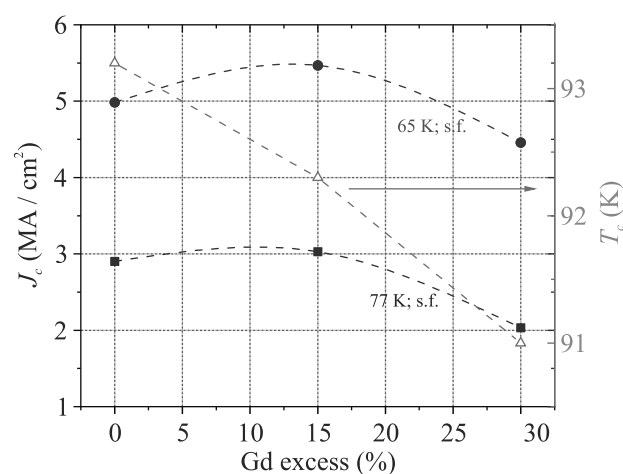


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость критического тока и температуры сверхпроводящего перехода в ВТСП – 2 лентах с разным содержанием Gd

Результаты прямых измерений критического тока при 77 К без внешнего магнитного поля для исходных образцов представлены на рис. 3. Наблюдается небольшое увеличение критического тока уже при наличии избытка +15 % Gd, при этом температура сверхпроводящего перехода остается неизменной. Так как длина когерентности при высоких температурах большая и сопоставима по значению с размером наблюдаемых включений, то вихрю легче закрепиться на них. Дальнейшее увеличение избытка Gd до +30 % приводит к падению критического тока как по сравнению со стехиометрическим образцом, так и по сравнению с образцом, где избыток достигает +15 % Gd. В этом случае за счет увеличения концентрации включений происходит уменьшение сверхпроводящих областей, что приводит к уменьшению критического тока. При этом его критическая температура становится ниже на 2 К. Вероятно, паде-

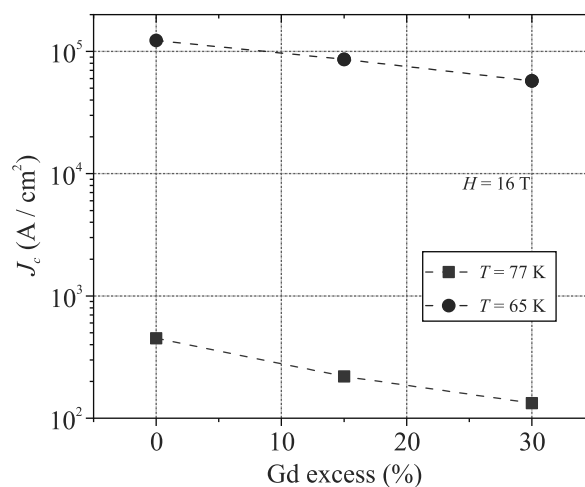


Рис. 4. Зависимость критического тока на 12 мм ленте от стехиометрического состава ленты. Отчетливо видно снижение критического тока при перенасыщении Gd при температуре измерений 77 и 65 К

ние критической температуры свидетельствует о возникновении напряжений на границе СП матрица–несверхпроводящая фаза Gd_2CuO_4 , увеличивающиеся с увеличением избытка по Gd.

Характер изменения критического тока в поле 16 Тл при температурах 77 и 65 К представлен на рис. 4. Наблюдается незначительное монотонное снижение критического тока с увеличением избытка по Gd. По всей видимости, это объясняется тем фактом, что при этих температурах размер образовавшихся дефектов в СП пленке значительно больше вихрей Абрикосова.

Из температурной зависимости продольного удельного сопротивления ρ_{ab} во внешнем магнитном поле была получена зависимость верхнего критического поля от температуры. Полученная экспе-

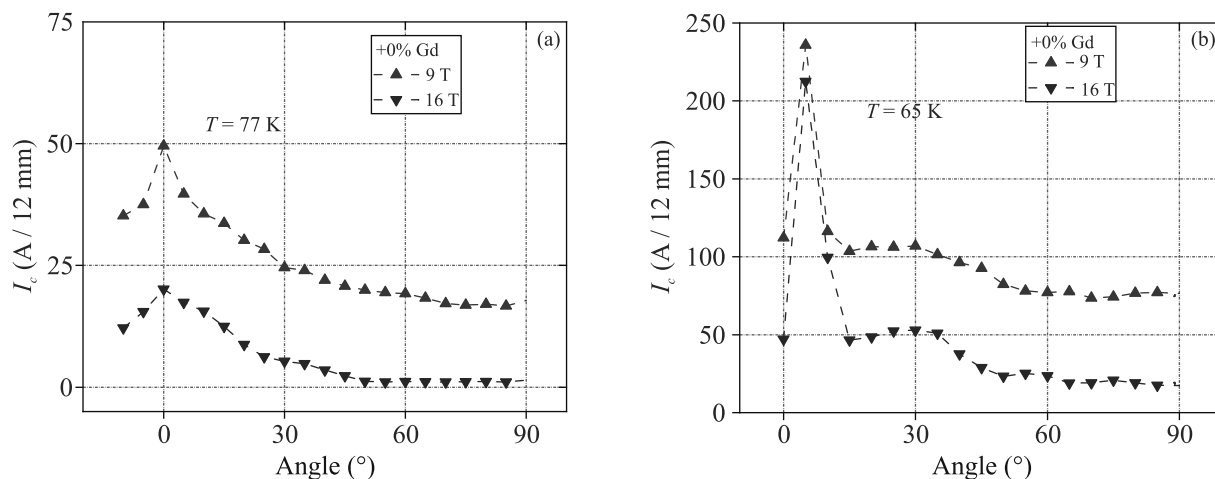


Рис. 5. (Цветной онлайн) Угловые зависимости критического тока образца +0 магнитных полях и при температурах 77 К (а) и 65 К (б)

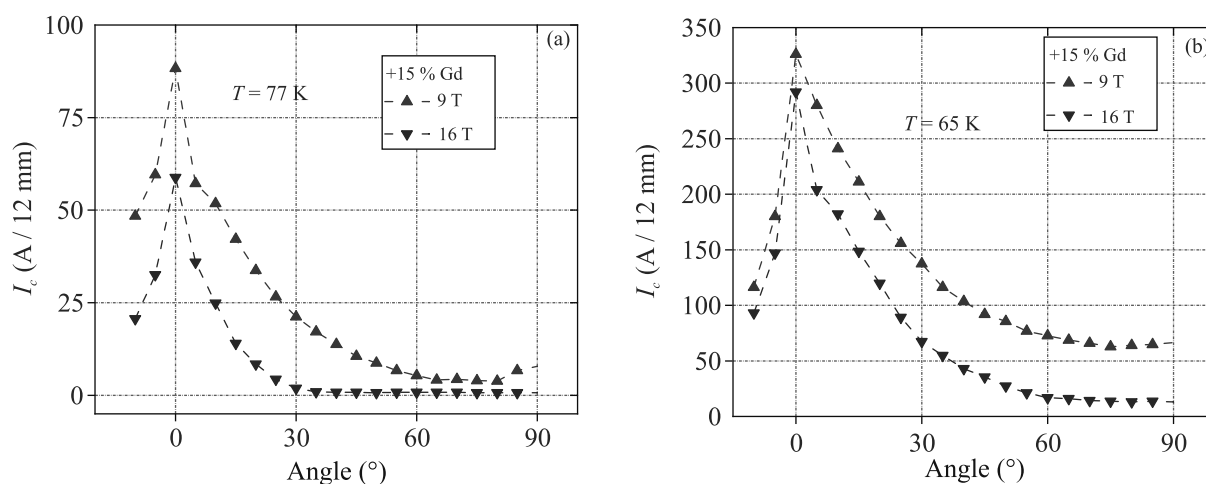


Рис. 6. (Цветной онлайн) Угловые зависимости критического тока образца +15 % Gd в приложенных магнитных полях и при температурах 77 и 65 К

риментальная зависимость была экстраполирована к нулевой температуре по модели Вертхамера–Гельфанда–Хоемберга [27]. По полученным данным было рассчитано верхнее критическое поле в пределе нулевой температуры для трех образцов: H_{c2} (+0 % Gd) = 48 Тл, H_{c2} (+15 % Gd) = 33.4 Тл и H_{c2} (+30 % Gd) = 42 Тл соответственно. Длина когерентности была оценена по формуле Гинзбурга–Ландау [28]. Значения длины когерентности составили для ξ (+0 % Gd) = 2.59 нм, ξ (+15 % Gd) = 3.13 нм и ξ (+30 % Gd) = 2.78 нм. Наблюдается, что с увеличением размеров и концентрации включений, длина когерентности увеличивается по сравнению с исходным образцом.

Далее были проведены измерения профиля критического тока как функция приложенного внешне-

го магнитного поля и его ориентации в конфигурации максимума силы Лоренца, т.е. для случая, когда поле перпендикулярно поверхности образца. На рис. 5 представлены угловые зависимости критического тока для стехиометрического образца. Отчетливо видно отсутствие пика, когда поле параллельно плоскости ab . Подавление критического тока в пике при 77 К составляет порядка 87 % и при 65 К порядка 95 % в поле 9 Тл по сравнению со значением критического тока в отсутствии внешнего магнитного поля. При 65 К отличие критического тока в полях не так существенно и по сравнению со значением критического тока без внешнего магнитного поля подавляется на 80 %. В случае, когда поле параллельно плоскости образца, для обеих температур и полей деградация критического тока более существенная.

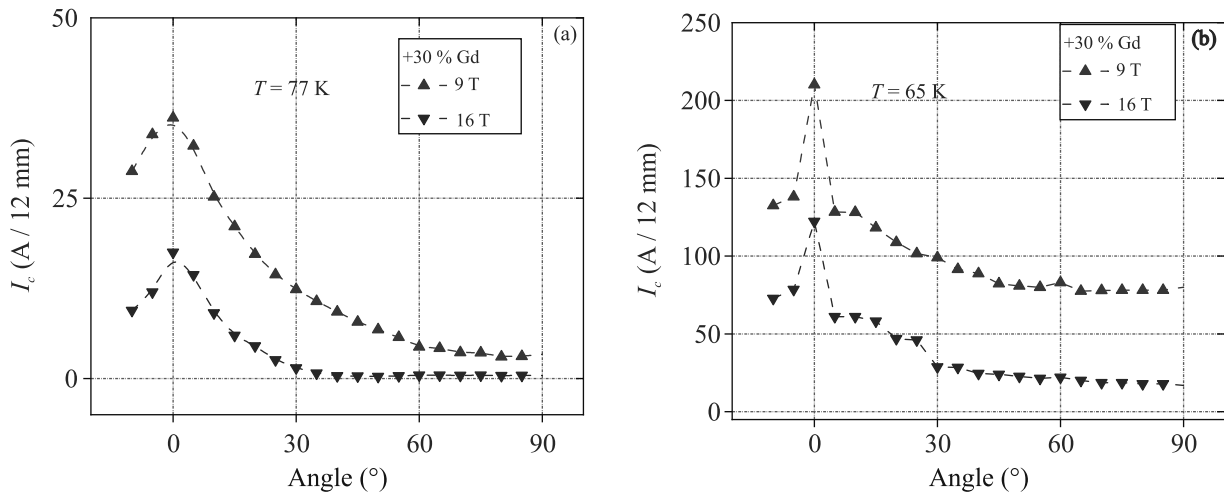


Рис. 7. (Цветной онлайн) Угловые зависимости критического тока образца +30 % Gd в приложенных магнитных полях и при температурах 77 и 65 K

Характер поведения для образца с избытком Gd +15 %, представленный на рис. 6, демонстрирует аналогичное поведение, как и для исходного образца, т.е. пик в случае, когда поле параллельно оси c , отсутствует при обеих температурах – 77 и 65 K. По всей видимости, такой характер поведения обусловлен тем, что обнаруженные включения Gd_2CuO_4 выстраиваются в цепочки вдоль направления плоскости ab , образуя слоистую структуру (см. рис. 1). При этом стоит отметить, что дефекты имеют не регулярную структуру. Таким образом, вихри пересекают такие дефекты и взаимодействуют с ними как с точечно-подобными дефектами. Образуется большое число слабых связей, что приводит к частичному подавлению параметра порядка и, следовательно, падению критической температуры сверхпроводящего перехода.

Для образца с избытком по Gd +30 % (рис. 7) на угловых зависимостях критического тока также не наблюдается пика для случая, когда внешнее магнитное поле параллельно оси c . В этом образце по данным микроструктурных исследований концентрация включений типа Gd_2CuO_4 возрастает по сравнению с образцом с избытком по Gd +15 % (рис. 6). Эти два факта наводят на предположение о том, что образовавшаяся в результате избытка Gd слоистая структура является менее эффективной для пиннинга вихревой структуры. Это также подтверждается более сильным падением критического тока в сильных магнитных полях.

4. Выводы. В данной работе были изготовлены образцы ВТСП лент на основе соединения $GdBCO$ с избыточным содержанием Gd, которое достигалось путем внесения изменений в технологический про-

цесс (мишени, режимы). По данным микроструктурного анализа выявлено, что в образцах с избытком Gd присутствуют включения несверхпроводящей фазы типа Gd_2CuO_4 в виде слоев, параллельных плоскости ab . Показано, что 15 %-й избыток Gd приводит к росту критического тока при температурах 77 и 65 K в нулевом внешнем магнитном поле, однако дальнейшее увеличение избытка Gd до 30 % вызывает его уменьшение. При этом температура сверхпроводящего перехода в первом случае не изменяется, а во втором – падает, что может быть связано с изменением напряженности кристаллической решетки [25]. Тем не менее, в поле 16 Тл сильного падения критического тока при избытке Gd +15 % не наблюдается, что, предположительно, связано с изменением типа пиннинга вихревой решетки за счет образования включений фазы Gd_2CuO_4 , выступающих в роли дополнительных центров пиннинга вихревой решетки. Обнаружено, что на угловых зависимостях критического тока для образцов с избытком Gd отсутствует явный пик во внешнем магнитном поле, параллельном оси c , что подтверждает предположение о смене характера пиннинга вихревой решетки вследствие изменения характерных размеров включений. Полученные результаты проведенных исследований могут быть использованы для усовершенствования технологии изготовления ВТСП лент 2-го поколения с более высокой токонесущей способностью.

Магнитные измерения выполнены при поддержке Российского научного фонда # 22-22-00570.

Исследования микроструктуры и анализ полученных результатов выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования (Государственное задание ОИВТ РАН # 075-01129-23-00).

1. D. Uglietti, *Supercond. Sci. Technol.* **33**, 053001 (2019).
2. Y. H. Zhou, D. Park, and Y. Iwasa, *Nat. Sci. Rev.* **10**, 3 (2023).
3. M. T. Naus, R. W. Heussner, A. A. Squitieri, and D. C. Larbalestier, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **7**, 1122 (1997).
4. A. Godeke, M. C. Jewell, C. M. Fischer, A. A. Squitieri, P. J. Lee, and D. C. Larbalestier, *J. Appl. Phys.* **97**, 9 (2005).
5. L. Rossi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **17**, 1005 (2007).
6. K. I. Sasaki, T. Nakamoto, N. Kimura, T. Tomaru, T. Ogitsu, N. Higashi, and T. Ichihara, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **17**, 1083 (2007).
7. B. Turck, *IEEE Trans. Magn.* **32**, 2264 (1996).
8. N. Mitchell, D. Bessette, R. Gallix, C. Jong, J. Knaster, P. Libeyre, C. Sborchia, and F. Simon, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **18**, 435 (2008).
9. S. Zhang, S. Xu, Z. Fan, P. Jiang, Z. Han, G. Yang, and Y. Chen, *Supercond. Sci. Technol.* **31**, 125006 (2018).
10. G. Blatter, M. V. Feigelman, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
11. L. Bottura, S. Prestemon, L. Rossi, and A. V. Zlobin, *Front. Phys.* **10**, 935196 (2022).
12. E. Ban, Y. Matsuoka, T. Yoshimura, and K. Takahashi, *Thin Solid Films* **338**, 118 (1999).
13. M. Inoue, S. Nishimura, T. Kuga, M. Kiuchi, T. Kiss, M. Takeo, T. Matsushita, Y. Iijima, K. Kakimoto, T. Saitoh, S. Awaji, K. Watanabe, and Y. Shiohara, *Phys. C: Supercond.* **372**, 794 (2002).
14. M. Iwakuma, K. Toyota, M. Nigo, T. Kiss, K. Funaki, Y. Iijima, T. Saitoh, Y. Yamada, and Y. Shiohara, *Phys. C: Supercond.* **412**, 983 (2004).
15. V. Chepikov, N. Mineev, P. Degtyarenko, S. Lee, V. Petrykin, A. Ovcharov, A. Vasiliev, A. Kaul, V. Amelichev, A. Kamenev, A. Molodyk, and S. Samoilnikov, *Supercond. Sci. Technol.* **30**, 124001 (2017).
16. S. M. Choi, G. M. Shin, and S. I. Yoo, *Phys. C: Supercond.* **485**, 154 (2013).
17. K. Nakashima, N. Chikumoto, A. Ibi, S. Miyata, Y. Yamada, T. Kubo, A. Suzuki, and T. Terai, *Phys. C: Supercond.* **463**, 665 (2007).
18. E. Mezzetti, B. Minetti, D. Andreone, R. Cherubini, L. Gherardi, and P. Metra, *J. Supercond.* **5**, 185 (1992).
19. D. Huang, H. Gu, H. Shang, T. Li, B. Xie, Q. Zou, D. Chen, W. Chu, and F. Ding, *Supercond. Sci. Technol.* **34**, 045001 (2021).
20. T. Matsunami, Y. Ichino, Y. Yoshida, A. Ichinose, and K. Matsumoto, *Phys. Proc.* **27**, 236 (2012).
21. M. Miura, M. Yoshizumi, Y. Sutoh, K. Nakaoka, S. Miyata, Y. Yamada, T. Izumi, Y. Shiohara, T. Goto, A. Yoshinaka, and A. Yajima, *Phys. C: Supercond.* **468**, 15-20, 1643 (2008).
22. A. A. Abrikosov, *Sov. Phys. JETP* **5**, 1174 (1957).
23. J. G. Lin, C. Y. Huang, Y. Y. Xue, C. W. Chu, X. W. Cao, and J. C. Ho, *Phys. Rev. B* **51**, 12900 (1995).
24. A. Molodyk, S. Samoilnikov, A. Markelov et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **11**, 2084 (2021).
25. A. V. Ovcharov, P. N. Degtyarenko, V. N. Chepikov, A. L. Vasiliev, S. Yu. Gavrillkin, I. A. Karateev, A. Yu. Tsvetkov, and A. R. Kaul, *Sci. Rep.* **9**, 15235 (2019).
26. O. Y. Gorbenko, S. V. Samoilnikov, I. E. Graboy, and A. R. Kaul, *Chem. Mater.* **14**, 4026 (2002).
27. E. Helfand, and N. R. Werthamer, *Phys. Rev.* **147**, 288 (1966).
28. V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *ZhETF* **20**, 1064 (1950).

Генерация квантовых вихрей волнами на поверхности сверхтекучего гелия

М. Р. Султанова^{+*1)}, И. А. Ремизов⁺, Л. П. Межов-Деглин⁺, А. А. Левченко⁺⁺

⁺Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

⁺⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 12 сентября 2023 г.

После переработки 16 сентября 2023 г.

Принята к публикации 16 сентября 2023 г.

Наблюдалось формирование квантовых вихрей двумя взаимно перпендикулярными волнами, возбужденными на поверхности сверхтекучего гелия. В экспериментах исследовали взаимодействие инжектированных под поверхность He-II отрицательных зарядов с вихревым течением жидкости, формируемым поверхностными волнами частотой от 20 до 49.9 Гц в интервале температур от 1.5 до 2.17 К. О взаимодействии зарядов с вихревыми течениями судили по распределению токов, регистрируемых вертикально ориентированными сегментами приемного коллектора. При температуре $T = 1.5$ К наблюдается эффективный захват инжектированных зарядов квантовыми вихрями, что приводит к существенному перераспределению токов между сегментами приемного коллектора. При температурах около $T = 1.7$ К заряды уходят из ловушек на квантовых вихрях. При дальнейшем повышении температуры инжектированные заряды рассеиваются на вихревых течениях нормальной компоненты, создаваемых поверхностными волнами.

DOI: 10.31857/S1234567823200089, EDN: orikor

1. Введение. Предметом настоящего исследования является изучение взаимодействия инжектированных отрицательных зарядов (отрицательно заряженных электронных пузырьков в жидком ^4He) с вихревыми течениями, которые создаются нелинейными волнами, распространяющимися на поверхности жидкого гелия. В нормальном жидком гелии He-I при $T > 2.17$ К генерируемое волнами вихревое течение является классическим и описывается уравнением Навье–Стокса. При температурах $T < 2.17$ К в вихревом движении участвуют нормальная и сверхтекучая компоненты. Особенностью сверхтекучей компоненты является квантование циркуляции скорости движения жидкости [1]. Квантовый вихрь представляет собой топологический дефект, который заканчивается на поверхности жидкого гелия или на стенках сосуда, т.е. обычно квантовые вихри простираются от стенки до стенки экспериментального сосуда или от стенки до свободной поверхности сверхтекучей жидкости [2]. Существуют также квантовые вихри в форме колец, которые могут формироваться, например, при движении в гелии инжектированных зарядов с высокими скоростями [3]. Взаимодействие пересекающихся квантовых вихрей между собой (“*reconnection*”) при-

водит к формированию сложных структур – вихревых клубков [4].

Экспериментально свойства квантовых вихрей изучались, в основном, в замкнутой геометрии, когда свободная поверхность жидкости отсутствовала [5, 6]. Однако недавно была опубликована статья, посвященная взаимодействию квантовых вихрей со свободной поверхностью сверхтекучей жидкости [7]. В этой работе исследовали динамику заряженных наночастиц, которые взаимодействовали с квантовыми вихрями, оканчивающимися на свободной поверхности жидкости. Выделены два типа траекторий частиц и связанных с ними вихревых структур: вертикальные линейные вихри, закрепленные одним концом на дне емкости, и полукольцевые вихри, движущиеся вдоль свободной поверхности жидкости.

В экспериментах [8] было показано, что на поверхности классической жидкости две взаимно перпендикулярные стоячие волны формируют периодическую структуру – шахматную доску – из вихрей противоположной завихренности. Период этой решетки равен длине поверхностной волны λ . Вихри проникают в объем жидкости, их завихренность Ω затухает с глубиной z по экспоненциальному закону $\Omega \sim \exp(-z/\zeta_0)$, где ζ_0 – глубина проникновения волн. В случае возбуждения стоячих капиллярных или гравитационных волн на поверхности сверхтекучего

¹⁾e-mail: mabinkaifft@issp.ac.ru

Не-II следовало бы ожидать, что наряду с обычными классическими вихрями, возбуждаемыми в нормальной компоненте жидкости, взаимодействие волн приводит к формированию петель квантовых вихрей, начинающихся и оканчивающихся на свободной поверхности сверхтекучей жидкости [7].

Для исследования особенностей вихревых структур, формируемых волнами на поверхности сверхтекучего Не-II, мы выбрали методику, ранее примененную в работе [9]. Электрон, инжектированный в жидкий гелий, формирует сферическую вакуумную полость ("пузырек") радиусом около $\sim 20 \text{ \AA}$ при давлениях насыщенных паров [10]. При низких температурах $\leq 1.5 \text{ K}$ отрицательный заряд локализуется на квантовом вихре в потенциальной яме глубиной ΔU , оцениваемой от 50 до 130 K согласно [11–14]. Однако с повышением температуры время жизни заряда в ловушке должно уменьшаться по экспоненциальному закону, $\tau \sim \exp(-\Delta U/T)$. О структуре вихревой системы и о взаимодействии зарядов с квантовыми вихрями можно судить, изменяя направления движения зарядов в объеме жидкости [15].

Таким образом, инжектированные в сверхтекучий гелий отрицательные заряды взаимодействуют с квантовыми вихрями и могут служить хорошими пробными частицами для обнаружения и изучения свойств квантовых вихрей [5].

Наши первые эксперименты были проведены при температурах $T = 1.8 \text{ K}$ и $T = 2.3 \text{ K}$ [9]. Было показано, что формирование вихревых структур стоячими волнами на свободной поверхности жидкого гелия приводит к отклонению зарядов от первоначальной траектории движения в приложенном электрическом поле вследствие рассеяния на вихревых течениях, формирующихся в объеме нормальной компоненты. Взаимодействие между волнами на поверхности жидкого гелия приводит к генерации, в основном, классических вихрей.

В цели настоящих экспериментов входила попытка обнаружения генерации квантовых вихрей нелинейными волнами, распространяющимися по поверхности сверхтекучего гелия по результатам изучения взаимодействия инжектированных отрицательных зарядов (электронных пузырьков) с вихревыми структурами, порождаемыми капиллярными или гравитационными волнами в слое Не-II в широком интервале температур вплоть до 1.5 K.

2. Методика. Исследования проводили в гелиевом оптическом криостате, в вакуумной полости которого была установлена камера с экспериментальной ячейкой. Камера соединена с гелиевой полостью криостата медным хладопроводом. Рабочая ячей-

ка представляет собой прямоугольный параллелепипед размерами $50 \times 50 \times 30 \text{ мм}$ с шестью несоприкасающимися электрически изолированными гранями (рис. 1). Жидкий гелий конденсировали в камеру из наружного транспортного сосуда дьюара через капилляр набора. Для устранения примесей гелий проходил через мелкопористый медный фильтр, охлажденный до 4.2 K. Рабочую температуру экспериментальной ячейки можно было варьировать от 1.5 до 4.2 K откачкой паров жидкого гелия из гелиевой полости криостата.

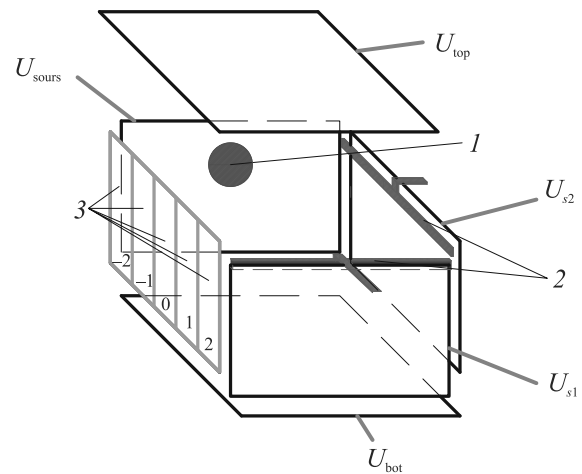


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной ячейки: 1 – источник зарядов, 2 – плунжеры, 3 – составной принимающий коллектор

Схема экспериментальной ячейки приведена на рис. 1. Верхняя грань ячейки изготовлена из прозрачной кварцевой пластины толщиной 2 мм, на которую снизу была напылена полупрозрачная металлическая пленка. На одной из вертикальных граней, выше центра, установлен точечный источник зарядов диаметром 3 мм (1 на рис. 1). Источник зарядов электрически соединен с гранью, на которой он установлен. На смежной источнику грани установлен составной регистрирующий коллектор, состоящий из 5 сегментов (3 на рис. 1) линейными размерами $9 \times 30 \text{ мм}$. Каждый сегмент коллектора был подключен к независимому усилителю тока, электрический сигнал с которого через АЦП поступал в компьютер.

Как и в работе [9], для возбуждения волн на поверхности гелия использовали два плоских волнопродуктора (плунжеры 2 на рис. 1), которые были установлены параллельно свободным смежным вертикальным граням на расстоянии 3 мм от стенки. Плунжеры приводились в движение электромагнитными приводами, переменное напряжение на которые подавалось с двухканаль-

ного функционального генератора. Они совершали возвратно-поступательные колебания в горизонтальной плоскости с частотой, задаваемой внешним генератором.

Напряжение на грани ячейки подавалось от пяти независимых источников постоянного напряжения с общей землей. Это позволяло создавать в объеме жидкости тянущие электрические поля заданной конфигурации, управляющие движением инжектированных зарядов от источника зарядов 1 к составному принимающему коллектору 3. При проведении измерений регистрировали зависимость тока на различных сегментах коллектора от времени до включения накачки, при включенной волновой накачке, и после отключения откачки. Чтобы подавить влияние случайных шумов и электрических наводок и чтобы выделить постоянную составляющую тока каждого сектора коллектора I_i , зарегистрированные зависимости подвергались Фурье фильтрации на низких частотах.

3. Экспериментальные результаты. На рисунке 2 представлены температурные зависимости токов $I_i(T)$, зарегистрированных секторами коллектора в отсутствие волновой накачки. К граням ячейки были приложены следующие напряжения: $U_{\text{sours}} = U_{s2} = -100$ В, $U_{\text{top}} = -50$ В, $U_{\text{bot}} = -100$ В, $U_{s1} = 0$ В. Видно, что ток, в основном, приходит на центральный 0 и на -1 сегменты коллектора. Плавное понижение значений токов $I_i(T)$ с ростом температуры связано с изменением вязкости He-II. Низкочастотные шумы на кривых $I_i(T)$ обусловлены, в основном, неконтролируемой вибрацией заряженной поверхности жидкого гелия в экспериментальной ячейке.

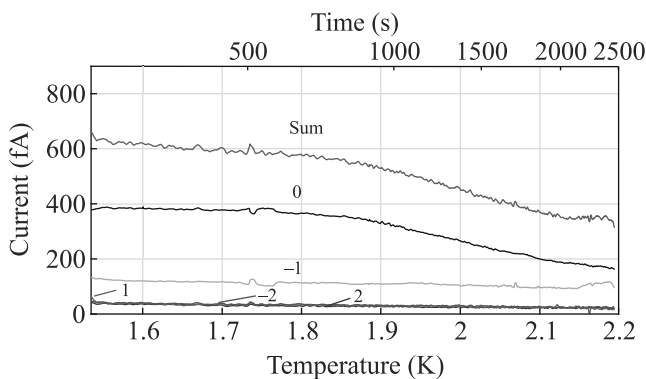


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости токов отрицательных зарядов $I_i(T)$, приходящих на сегменты коллектора, при плавном повышении температуры He-II в интервале $T = 1.5\text{--}2.17$ К в отсутствие накачки

Ниже, на рис. 3 показано, как изменяется распределение токов по секторам принимающего коллектора в He-II при постоянной температуре $T = 1.5$ К при включении волновой накачки на частоте $f_g = 49.88$ Гц на 140-й с и последующем выключении накачки на 290-й с. Распределение постоянных напряжений на гранях ячейки то же, что и на рис. 2. Моменты включения и выключения переменного напряжения на приводах плунжеров указаны пунктирными вертикальными прямыми. При частоте накачки $f_g = 49.88$ Гц длина возбуждаемой на поверхности стоячей капиллярной волны на поверхности $\lambda = 0.2$ см (волновой вектор $k \approx 31.4\text{ см}^{-1}$). В соответствии с оценками, приводимыми в работе [9], при амплитуде электрического напряжения, подаваемого на приводы плунжеров $A = 7000$ мВ, амплитуда капиллярных волн составляла $H \approx 0.003$ см и крутизна волны $kH \approx 0.05$.

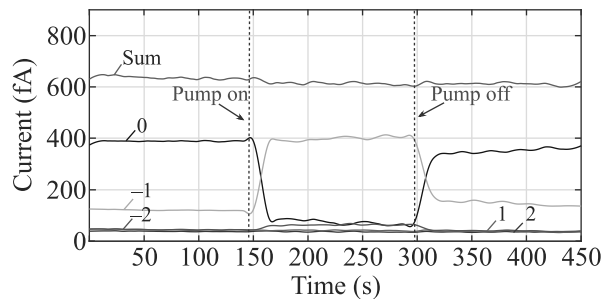


Рис. 3. (Цветной онлайн) Влияние волновой накачки частотой $f_g = 49.88$ Гц на распределение токов по секторам принимающего коллектора в He-II при постоянной температуре $T = 1.5$ К. Пунктирные прямые указывают момент включения и выключения накачки

При включении накачки коллекторный ток перераспределился, в основном, между тремя сегментами. Ток на 0 сегменте $I_0(t)$ уменьшился с 390 до ≈ 50 фА, на сегменте -1 $I_{-1}(t)$ увеличился до ≈ 400 фА, ток на -2 сегменте $I_{-2}(t)$ также слегка увеличился. Суммарное значение коллекторного тока $I_{\text{sum}} \approx 640$ фА практически не изменилось. После выключения накачки токи, регистрируемые отдельными сегментами, практически возвращались к исходным значениям.

На рисунке 4 показаны зависимости токов от температуры на сегментах коллектора $I_i(T)$ при включенной накачке на частоте $f_g = 49.88$ Гц, которые были зарегистрированы при плавном повышении температуры жидкости от 1.5 до 2.17 К. Время изменения температуры составляло 1850 с, т.е. температура повышалась со скоростью ≈ 16 мК/мин. Волновая накачка была включена в течение всего экс-

перимента. Отметим, что в интервале температур $T = 1.5\text{--}1.7\text{ K}$ распределение токов по сегментам на рис. 4 качественно совпадает с распределением, показанным на рис. 3. При дальнейшем повышении температуры в узком интервале температур $T = 1.68\text{--}1.75\text{ K}$ значения токов I_0 и I_{-1} резко изменяются: ток I_0 заметно возрастает, а I_{-1} убывает.

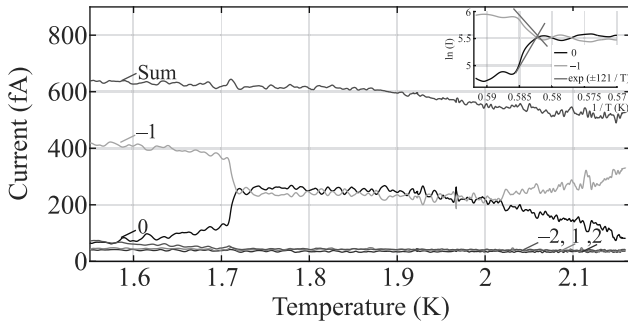


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости токов отрицательных зарядов, регистрируемых сегментами коллектора при включенной волновой накачке при плавном повышении температуры He-II от 1.5 до 2.17 K. На вставке показана зависимость токов отрицательных зарядов $I_0(T)$ и $I_{-1}(T)$ в полулогарифмическом масштабе от обратной температуры $1/T$ в интервале температур $T = 1.68\text{--}1.75\text{ K}$. Прямые линии соответствуют зависимостям $I = \exp(\pm 121/T)$

На вставке рис. 4 показаны зависимости токов отрицательных зарядов I_0 и I_{-1} от обратной температуры в полулогарифмическом масштабе в интервале температур $T = 1.68\text{--}1.75\text{ K}$. Сплошные прямые соответствуют зависимостям $I \sim \exp(\pm \Delta/T)$, где $\Delta = 121\text{ K}$.

Как видно на рис. 4, при температурах выше 2.0 K распределение токов по отдельным сегментам при включенной накачке вновь заметно изменяется по сравнению с распределением токов в отсутствии накачки на рис. 2. Ток на центральном коллекторе $I_0(T)$ падает до величины 80 фА при $T = 2.17\text{ K}$, а ток на сегменте -1 $I_{-1}(T)$ возрастает до величины 330 фА. Плавное уменьшение суммарного тока $I_{\text{sum}}(T)$, токов $I_0(T)$ и $I_{-1}(T)$ с ростом температуры выше 1.9 K может быть связано с возрастанием плотности нормальной компоненты и коэффициента кинетической вязкости жидкого гелия вблизи T_λ [9, 16].

Отметим, что токи на остальных сегментах коллектора в интервале температур 1.7–2.17 K при включенной накачке практически не изменялись.

4. Обсуждение. В работе [17] было показано, что распределение стационарной вертикальной завихренности на поверхности и в объеме жидкости $\Omega(x, y, z)$, формируемой двумя стоячими взаимно

перпендикулярными волнами на поверхности жидкости, может быть описано суммой двух одинаковых слагаемых, отличающихся только множителями:

$$\Omega(z) = \left(2e^{-2kz} + \sqrt{2}e^{-\sqrt{2}kz} \right) H_x H_y \omega k^2 \times \sin(\varphi) \sin(kx) \sin(ky). \quad (1)$$

Первое слагаемое описывает вклад завихренности, которая связана с увлечением Стокса, а второе слагаемое обусловлено нелинейным взаимодействием волн – завихренность Эйлера.

Завихренность, генерируемая за счет увлечения Стокса, формируется на поверхности и в объеме жидкого гелия за время установления стоячей волны. В нашем эксперименте это время равно удвоенному времени пробега волны от стенки до стенки ячейки, $\approx 1\text{ c}$ [18].

Генерация вихревых движений в объеме сверхтекучей жидкости за счет нелинейного взаимодействия между волнами происходит в приповерхностном вязком подслое, который служит источником завихренности. При волновой накачке на частоте $f_g = 49.88\text{ Гц}$ глубина вязкого подслоя на поверхности He-II при $T = 1.5\text{ K}$ составляет около $\delta = \sqrt{\nu/\omega} \approx 5 \cdot 10^{-4}\text{ см}$ [19]. Эта глубина много меньше длины капиллярной волны $\lambda = 0.2\text{ см}$ и амплитуды возбуждаемых волн $H \approx 0.003\text{ см}$. Завихренность проникает в объем вязкой жидкости с характерным вязким временем $\tau_{\text{vis}} = (2\nu k^2)^{-1} \approx 5.5\text{ с}$. После включения или выключения накачки волн на временах $t \gg \tau_{\text{vis}}$ завихренность изменяется по экспоненциальному закону, $\Omega_E \sim \exp(-t/\tau_{\text{vis}})$ [20].

На рисунке 5 приведена зависимость характерного времени τ_0 от волнового вектора k (частоты накачки f_g), полученная аппроксимацией экспоненциальной функции $\exp(-t/\tau_0)$ к экспериментальным зависимостям $I_i(t)$ при включении и выключении накачки на пяти резонансных частотах. Значения частот τ_0 , представленные красными точками на рис. 5, были получены усреднением по результатам четырех измерений на каждой из частот. Сплошной кривой показана расчетная зависимость вязкого времени τ_{vis} от волнового вектора $\tau_{\text{vis}} = (2\nu k^2)^{-1}$.

Видно, что характерное время τ_0 уменьшается с ростом частоты и близко по значениям к вязкому времени τ_{vis} . Ошибки в расчетах τ_0 обусловлены довольно высоким уровнем токов смещения, связанных с колебаниями поверхности жидкости.

Как было отмечено выше, после включения накачки на поверхности жидкого гелия возникает решетка вихрей – “шахматная доска” (1), состоящая из вихрей, имеющих попарно противоположные завих-

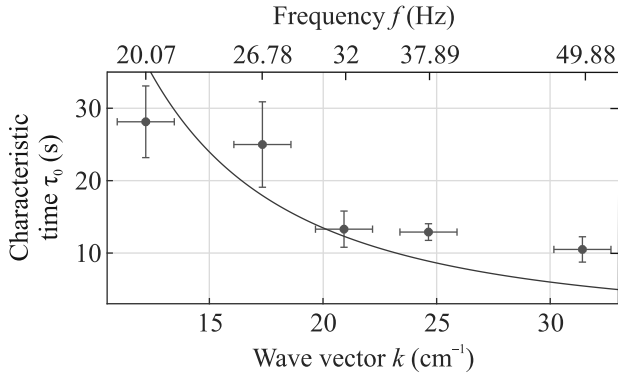


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость характерного времени изменения тока τ_0 от волнового вектора k волны накачки при $T = 1.5$ К. Точки – эксперимент, сплошная кривая соответствует зависимости $\tau_{vis} = (2\nu k^2)^{-1}$

ренности. При температуре $T = 1.5$ К плотность нормальной компоненты составляет около 11 % от полной плотности жидкого гелия, поэтому следует ожидать, что при возбуждении вихревых течений в He-II доминирующую роль должна играть завихренность, возбуждаемая в сверхтекучей компоненте. Можно предположить, что квантовые вихри начинаются на одном вихре шахматной доски на поверхности, а заканчиваются на соседнем с противоположной завихренностью, т.е. под поверхностью формируются петли квантовых вихрей. В этом случае из соображений минимума энергии длина заряженного вихря должна быть близка к $\lambda/2$, что может приводить к формированию под поверхностью выделенных направлений, вдоль в которых, в основном, располагаются петли квантовых вихрей. Под поверхностью возникает анизотропия в распределении плотности квантовых вихрей.

Оценим плотность квантовых вихрей, которые формируются под поверхностью. Циркуляция скорости вихревого движения квантовой жидкости определяется соотношением

$$\Gamma = \int_S \text{rot } V dS = n \frac{h}{m}, \quad (2)$$

где интегрирование ведется по площади S , $\text{rot } V = \Omega$ – завихренность, h – постоянная Планка, m – масса атома гелия-4, n – количество вихрей на площади S . Отсюда по порядку величины плотность квантовых вихрей $N \sim \Omega / (\frac{h}{m})$. Завихренность вихря решетки на поверхности жидкости при накачке на частоте 49.88 Гц, оцененная по формуле (1), равна приблизительно $\Omega \approx 3 \text{ с}^{-1}$. Тогда средняя плотность квантовых вихрей под поверхностью сверхтекучего гелия составляет по порядку величины $N \sim \Omega / \frac{h}{m} = 10^3 \text{ см}^{-2}$.

Электрическое поле E прижимает движущиеся в жидком гелии отрицательные заряды к свободной поверхности жидкости. Направленная вверх вертикальная составляющая силы eE на расстоянии z_0 под поверхностью сравнивается с отталкивающей силой изображения зарядов [21],

$$eE = e^2 / 16 z_0^2 \pi \epsilon_0 (\epsilon_i - \epsilon_g) / \epsilon_i (\epsilon_i + \epsilon_g). \quad (3)$$

В результате в жидком He-II в вертикальном электрическом поле напряженностью $E \approx 10 \text{ В/см}$ на расстоянии $z_0 \approx 100 \text{ нм}$ от поверхности возникает квазидвумерный заряженный слой отрицательных зарядов плотностью $\sigma \approx 10^7$ зарядов/см² (диэлектрическая проницаемость жидкого ⁴He и насыщенного пара равна $\epsilon_i = 1.057$ и $\epsilon_g = 1.00$, соответственно). При этой оценке, естественно, не учитывается возможность квантового туннелирования электронов из вакуумных пузырьков в пар, т.е. предполагается, что образующийся под поверхностью квазидвумерный заряженный слой плотностью $\sigma \sim 10^7$ зарядов/см² экранирует вертикальную составляющую приложенного электрического поля, и среднее расстояние между электронными пузырьками в слое составляет $\approx 3 \text{ мкм}$. Отметим, что квазидвумерный заряженный слой располагается в вязком подслое, где возбуждается завихренность [8].

Далее, предполагаем, что движущиеся заряды могут захватываться квантовыми вихрями, так как температура He-II в рабочей ячейке ниже 1.7 К. Один квантовый вихрь длиной $\lambda/2 = 0.1 \text{ см}$, расположенный на расстоянии z_0 от поверхности, может захватить до 300 электронных пузырьков. Если средняя плотность порожденных волновой накачкой квантовых вихрей $N \approx 10^3 \text{ см}^{-2}$, то плотность захваченных вихрями зарядов в среднем может достигать $\sigma_{tr} \approx 3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$, т.е. почти в 30 раз меньше плотности свободных незахваченных зарядов $\sigma \sim 10^7 \text{ см}^{-2}$ в квазидвумерном слое. В результате, движущиеся от источника зарядов к коллектору электронные пузырьки при охлаждении He-II ниже 1.7 К могут рассеиваться на заряженных квантовых вихрях. Иначе говоря, при включении волновой накачки на поверхности жидкого ⁴He наряду с возбуждением обычных классических вихрей в объеме нормальной компоненты сверхтекучего He-II, как это было показано ранее в экспериментах [9], в сверхтекучей компоненте He-II образуются также квантовые вихри, которые могут захватывать отрицательно заряженные электронные пузырьки при температурах ниже 1.7 К. Формирование сложных структур пузырьково-квантовый вихрь в конденсате Бозе–Эйнштейна подробно исследовано в работе [22].

На вставке рис. 4 показаны зависимости токов I_0 и I_{-1} в полулогарифмическом масштабе от обратной температуры $1/T$ в интервале температур $T = 1.68\text{--}1.75$ К. Время прохождения этого температурного интервала составило более 200 с. Так как скорость повышения температуры невелика, а время захвата заряда в ловушке при $T \approx 1.68$ К составляет ~ 10 с при сопоставимой плотности квантовых вихрей [14], то можно предположить, что распределение зарядов в ловушках находится в квазиравновесном состоянии. Плотность захваченных зарядов σ_{tr} пропорциональна времени жизни зарядов в ловушке на квантовом вихре τ_{tr} и может быть описана экспоненциальной функцией вида $\sigma_{tr} \sim \exp(-\Delta/T)$. Резкое изменение токов $I_i(T)$ при температурах вблизи 1.7 К связано с процессами выхода отрицательных зарядов из ловушек на квантовых вихрях. Можно предположить, что отклонения токов I_0 и I_{-1} от исходных значений ΔI_i при изменении температуры вблизи 1.7 К пропорциональны концентрации зарядов на квантовых вихрях σ_{tr} , т.е. $\Delta I_i \sim \exp(-\Delta/T)$. На вставке прямыми линиями показаны экспоненциальные зависимости с $\Delta = 121$ К. Эта оценка глубины ловушки довольно близка к оценке глубины потенциальной ямы $\Delta = 132$ К, полученной в экспериментах [12], где измеряли среднее время захвата отрицательных зарядов в ловушки на квантовых вихрях в He-II при температурах вблизи 1.7 К. Близость двух оценок энергий активаций и совпадение температурных интервалов подтверждает наше предположение. Поскольку при температурах выше $T = 1.7$ К вероятность захвата заряда ловушкой мала [11–14], квантовые вихри в He-II оказываются электрически нейтральными. Поэтому при нагреве выше 1.7 К основную роль в рассеянии отрицательных зарядов на вихревых течениях в He-II играет механизм, рассмотренный ранее в работе [9], – увлечение подвижных зарядов вихревыми течениями в нормальной компоненте.

5. Заключение. Впервые экспериментально установлено, что взаимодействие двух взаимно ортогональных стоячих волн на поверхности сверхтекучего He-II при температурах ниже 1.7 К приводит к формированию вблизи поверхности квантовых вихрей, которые могут захватывать прижимаемые к поверхности жидкости внешним электрическим полем инжектированные отрицательные заряды (электронные пузырьки радиусом около 20 ангстрем). Рассеяние свободных зарядов на заряженных вихрях приводит к изменению направления их движения под поверхностью жидкости в постоянном электрическом поле. При температурах

$1.7 < T < 2.17$ К захват отрицательных зарядов квантовыми вихрями становится несущественным, и при включении волновой накачки на поверхности движущиеся в электрическом поле заряды рассеиваются, в основном, на вихревых течениях, генерируемых поверхностными волнами в нормальной компоненте сверхтекучего He-II.

Работа была выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 23-72-30006.

1. W. F. Vinen, Proceedings of the Royal Society A **260**, 218 (1961).
2. W. F. Vinen and R. J. Donnelly, Phys. Today **60**(4), 43 (2007).
3. P. M. Walmsley, A. A. Levchenko, and A. I. Golov, J. Low Temp. Phys. **145**, 143 (2006).
4. S. K. Nemirovskii, Phys. Rev. B **102**, 064511 (2020).
5. P. M. Walmsley, A. I. Golov, H. E. Hall, A. A. Levchenko, and W. F. Vinenet, Phys. Rev. Lett. **99**, 265302 (2007).
6. W. F. Vinen, J. Low Temp. Phys. **145**, 7 (2006).
7. P. Moroshkin, P. Leiderer, K. Kono, S. Inui, and M. Tsubota, Phys. Rev. Lett. **122**, 174502 (2019).
8. S. V. Filatov, V. M. Parfenyev, S. S. Vergeles, M. Yu. Brazhnikov, A. A. Levchenko, and V. V. Lebedevand, Phys. Rev. Lett. **116**, 054501 (2016).
9. I. A. Remizov, M. R. Sultanova, A. A. Levchenko, and L. P. Mezhev-Deglin, Fizika Nizkikh Temperatur **47**, 409 (2021) [Low Temperature Physics **47**, 378 (2021)].
10. R. J. Donnelly, *Quantized vortices in Helium II*, Cambridge University Press, Cambridge (1991), v. 233, p. 690.
11. R. J. Donnelly, Phys. Rev. Lett. **14**, 39 (1965).
12. R. L. Douglass, Phys. Rev. Lett. **13**, 791, (1964).
13. D. Mateo, J. Eloranta, and G. A. Williams, J. Chem. Phys. **142**, 064510 (2015).
14. J. W. P. Pratt and J. W. Zimmermann, Phys. Rev. **177**, 412 (1969).
15. P. M. Walmsley, A. A. Levchenko, S. E. May, and A. I. Golov, J. Low Temp. Phys. **146**, 511 (2007).
16. R. Donnelly and C. F. Barenghi, J. Phys. Chem. Ref. Data **27**(6), 1217 (1998).
17. S. V. Filatov and A. A. Levchenko, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **14**, 751 (2020).
18. S. V. Filatov, A. V. Poplevin, A. A. Levchenko, and V. M. Parfenyev, Physica D: Nonlinear Phenomena **434**, 133218 (2022).
19. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, Pergamon press, N.Y. (1989), v. 6.
20. V. M. Parfenyev and S. S. Vergeles, Phys. Rev. Fluids **5**, 094702 (2020).
21. V. B. Shikin and Yu. P. Monarkha, *Two-dimensional electron system in helium*, Nauka, Fizmatlit, Moscow (1989).
22. V. P. Ruban, JETP **133**, 779 (2020).

Термоиндуцированное переключение намагниченности субмикронных Ni частиц, сформированных на монокристаллическом триборате лития

Д. А. Бизяев, А. П. Чукланов¹⁾, Н. И. Нургазизов, А. А. Бухараев

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского,
Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр РАН”, 420029 Казань, Россия

Поступила в редакцию 6 июля 2023 г.

После переработки 21 сентября 2023 г.

Принята к публикации 22 сентября 2023 г.

В работе изучалось влияние термоиндуцированного магнитоупругого эффекта на поле переключения намагниченности субмикронных Ni частиц. Для этого частицы размерами $0.9 \times 0.3 \times 0.03$ мкм были сформированы на поверхности подложки, изготовленной из монокристаллического трибората лития (LiB_3O_5). Было экспериментально показано, что за счет данной подложки можно существенно (более чем в полтора раза) снизить значение поля переключения частиц при изменении температуры образца с 30 до 45 °С. Наблюдаемое снижение поля переключения связано с наводимой в частицах магнитоупругой анизотропией за счет разности в термических коэффициентах расширения подложки по разным кристаллическим осям.

DOI: 10.31857/S1234567823200090, EDN: orkdif

Одной из проблем использования магнитных сред для записи и хранения информации являются два взаимоисключающих требования к коэрцитивной силе такой среды. С одной стороны, требуется высокая коэрцитивная сила среды для хранения информации с целью повышения помехоустойчивости и сроков хранения. С другой стороны, требуется низкая коэрцитивная сила среды при записи информации с целью снижения количества энергии, потребляемой такими устройствами. Одним из методов решения этой проблемы является HAMR – метод термоассистированной магнитной записи информации (Heat-Assisted Magnetic Recording) [1–3]. В этом методе запись бита информации осуществляется с помощью внешнего магнитного поля на отдельную ферромагнитную частицу, которая в этот момент подогревается, например, с помощью сфокусированного импульсного лазерного излучения [1]. Коэрцитивная сила частицы за счет нагрева существенно снижается, и запись информации может происходить при достаточно небольших значениях внешнего магнитного поля. Далее частица остывает, и при хранении информации ее коэрцитивная сила остается достаточно большой.

Одним из недостатков классического HAMR являются высокие энергозатраты. Так, например, для снижения коэрцитивного поля в 1.5 раза пермалло-

евые частицы необходимо нагреть до температуры примерно 75 % от их температуры Кюри, что составляет около 600 °С [4]. Кобальт имеет еще более высокую температуру Кюри (1120 °С) [5], соответственно, для частиц, изготовленных из него или из сплавов на его основе, будет нужен нагрев до еще более высоких температур. Наиболее перспективным металлом для создания HAMR устройств может оказаться никель, имеющий сравнительно низкую температуру Кюри 358 °С [5], и сплавы на его основе. Для создания более энергоэффективных HAMR устройств можно использовать ферромагнитные сплавы, имеющие температуру Кюри, близкую к комнатной, однако при этом возникает проблема, связанная с возможной потерей хранимой информации при случайном перегреве. Снизить коэрцитивную силу частиц можно не только за счет их нагрева, но и за счет магнитоупругого эффекта, если создать в частицах ось анизотропии, перпендикулярную оси легкой намагниченности частиц (вдоль которой производится переключение их намагниченности). Для этого можно сформировать частицы на подложке с анизотропным коэффициентом термического расширения, например, поливинилиденфториде (ПВДФ) [6] или ниобате лития (LiNbO_3) [7]. При этом наводимую анизотропию можно контролировать, изменяя температуру образца. В некоторых случаях такие подложки можно использовать не только для сни-

¹⁾e-mail: a.chuklanov@gmail.com

жения коэрцитивной силы сформированных на них микроструктур, но и для изменения направления их намагниченности. В работе [6] был продемонстрирован циклический поворот намагниченности на 90° тонкой пленки FeGa при изменении температуры образца в интервале 7–47 °C. В работе [7] было продемонстрировано управление магнитной структурой CoNi микрочастиц. Было показано, что намагниченность CoNi микрочастицы можно развернуть на 90° за счет изменения температуры образца в интервале 27–127 °C. Кроме того, наблюдалось существенное снижение величины поля переключения такой микрочастицы за счет наводимой магнитоупругой анизотропии.

С точки зрения реализации энергоэффективного HAMR наибольший интерес представляют ферромагнитные частицы, у которых состояние однородной или близкой к однородной (квазиоднородной) намагниченности разворачивается на 180° и сохраняется после отключения внешнего поля и понижения температуры структуры до исходной (т.е. температуры хранения информации). Под “квазиоднородной намагниченностью” здесь понимается такое состояние магнитной подсистемы объекта с размерами заметно больше, чем радиус однодоменности, при котором из-за анизотропии формы в нём не образуется многодоменное состояние. Такой объект может обладать заметно отличным от нуля суммарным магнитным моментом, который можно зарегистрировать в эксперименте. Обычно квазиоднородной структурой намагниченности обладают планарные частицы, имеющие форму сильно вытянутого эллипса, треугольные и четырехугольные частицы с различной степенью вогнутости сторон [8, 9]. При подходящем размере и материале, в отсутствие внешних воздействий (магнитного поля, механического напряжения), у эллиптических и четырехугольных вогнутых планарных частиц могут наблюдаться стабильные состояния с квазиоднородной намагниченностью, отличающиеся на 180° .

В настоящее время большое количество научных и исследовательских коллективов использует пьезоэлектрические подложки для создания магнитоупругой анизотропии в частицах. Величина анизотропии контролируется прикладываемым к подложке электрическим потенциалом. Обзоры результатов таких исследований проведены в работах [10, 11]. В частности, в табл. 1 работы [10] приведены используемые поля и энергии поворота намагниченностей. Основными объектами изучения выступают планарные частицы высотой 10–30 нм с латеральными размерами 100–150 нм, изготовленные из Ni и Terfenol-D

($\text{Tb}_x\text{Dy}_{1-x}\text{Fe}_2$, $x \sim 0.3$). Частицы таких размеров, как правило, являются однодоменными и для изменения направления намагниченности необходимо прикладывать большие механические напряжения, сильные внешние поля или оба этих фактора вместе [11]. Увеличивая размер частицы и подбирая анизотропию формы, можно снизить коэрцитивную силу, сохранить преимущественное направление магнитных моментов и, как следствие, заметно отличный от нуля суммарный магнитный момент (иными словами, сохранить квазиоднородную намагниченность), что позволяет использовать для переключения более слабые магнитные поля, повышая энергоэффективность.

В данной работе исследовалось влияние термоиндуцированного магнитоупругого эффекта на поле переключения планарных прямоугольных частиц. Частицы имели размеры $0.9 \times 0.3 \times 0.03$ мкм и были изготовлены из Ni. Как показали наши предыдущие исследования [12], реакция магнитной структуры Ni микрочастиц на наводимые механические напряжения сопоставима с FeGa микрочастицами, имеющими очень высокое значение магнитострикции ($200\text{--}400 \times 10^{-6}$, в зависимости от состава), и значительно превосходит другие чистые металлы. Это связано с низкой намагниченностью насыщения Ni (490 кА/м) и достаточно большой по абсолютному значению константой магнитострикции ($-37 \cdot 10^{-6}$) [13].

В качестве подложки для формирования частиц использовался монокристаллический триборат лития (LiB_3O_5 , далее LBO) фирмы HG Optronics. Для улучшения адгезии Ni с подложкой, а также для снятия электростатического заряда при проведении измерений с помощью магнитно-силового микроскопа (MCM), на поверхность LBO была предварительно напылена сплошная пленка Ti толщиной 5 нм. Во время MCM измерений данная пленка заземлялась. Для напыления Ti и Ni на поверхность подложки использовался метод распыления твердотельной мишени электронным лучом в условиях сверхвысокого вакуума. Напыление Ni проводилось при температуре 35 °C через плотно прижатую к поверхности образца металлическую сетку с квадратными отверстиями. Отверстия имели размер 7.5 мкм, расстояние между ними составляло 7.2 мкм. Далее, с помощью сканирующей зондовой литографии из отдельной квадратной поликристаллической Ni микрочастицы размером 7.5 мкм формировался массив субмикронных частиц прямоугольной формы, т.е. весь лишний металл фактически соскребался с поверхности подложки иглой сканирующего зондового микроскопа (так называемая “scratching” методика). Излишки Ni по-

сле отделения от частиц имели плохую адгезию к поверхности подложки и удалялись промывкой в дистиллированной воде с использованием ультразвуковой ванны.

При формировании субмикронных частиц необходимо было решить две задачи. Первая задача состояла в выборе такого расстояния между частицами, которое позволило бы избежать их взаимного влияния на процесс переключения направления намагниченности. Для этого использовался подход, предложенный в работе [14]. Простые расчеты показали, что в приближении точечного диполя для геометрии образца на рис. 1 (среднее расстояние между

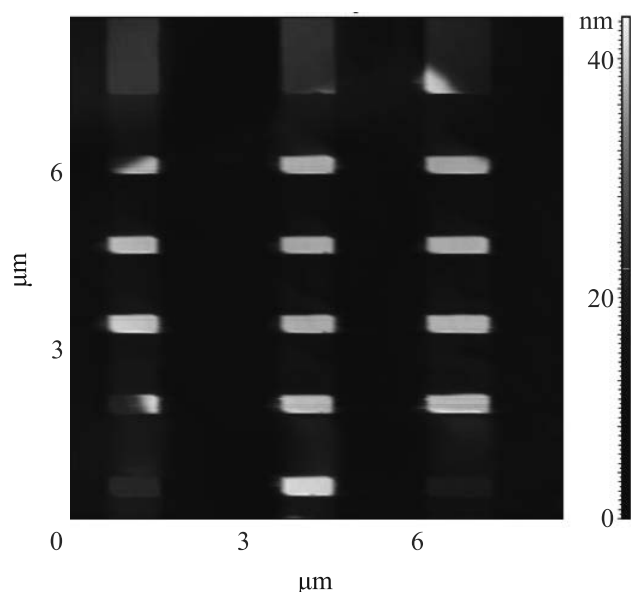


Рис. 1. (Цветной онлайн) Атомно-силовое изображение массива субмикронных Ni частиц, сформированного из одной квадратной микрочастицы 7.5 мкм

краями частиц вдоль длинной оси 1.5 мкм, вдоль короткой 1.2 мкм) наводимое магнитное поле от 4 ближайших соседей не превышало 25 % от коэрцитивного поля частиц. Полученная оценка согласуется с результатами работы [15], где для эллипсоидальных Co частиц размерами около 0.2 мкм было показано, что значимое взаимное влияние возникает на расстоянии 40 нм между краями частиц, при расстоянии 600 нм никакого взаимодействия не наблюдалось (магнитный момент у Co при этом заметно больше, чем у Ni). Вторая задача заключалась в необходимости исключения влияния на поле переключения частиц оставшегося массивного материала. Поэтому большие квадратные 7.5 мкм микрочастицы были удалены по периметру от исследуемых объектов. Из-за особенностей метода изготовления частиц, часть

из них имела большое отклонение от заданной формы и размеров, поэтому из двух массивов частиц общим количеством 28 штук при анализе учитывались только 15 частиц нужного размера.

Зондовая литография и МСМ измерения были выполнены на сканирующем зондовом микроскопе (СЗМ) Ntegra. Для литографии использовались алмазные зонды "D300" (SCDprobes). Для МСМ измерений использовались низкомомментные магнитные зонды "PPP-LM-MCMR" (Nanosensor). Также, для снижения влияния МСМ зонда на исследуемые частицы, все МСМ измерения выполнялись в однопроводном режиме. СЗМ позволял в процессе магнитно-силовых измерений создавать постоянное магнитное поле до ± 0.08 Тл в плоскости образца и нагревать его от комнатной температуры до 150 °С. Во время МСМ измерений образец располагался таким образом, чтобы внешнее магнитное поле было направлено вдоль длинной стороны частиц.

Плоскость, на которой формировались частицы, была образована осями кристалла x и z . Согласно данным производителя коэффициенты термического расширения LBO вдоль оси x $\alpha_x = 10.8 \cdot 10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, вдоль оси z $\alpha_z = 3.4 \cdot 10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Сформированные частицы имели поликристаллическую форму (магнитокристаллическая анизотропия равна нулю) и изотропный коэффициент термического расширения, который согласно литературным данным составляет $\alpha_p = 1.3 \cdot 10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ [5]. Частицы были сформированы таким образом, чтобы их длинная ось совпадала с осью x подложки. Таким образом, при увеличении температуры образца происходило растяжение частиц вдоль этой оси (рис. 2) и наводимая одноосная деформация при изменении температуры (ΔT)

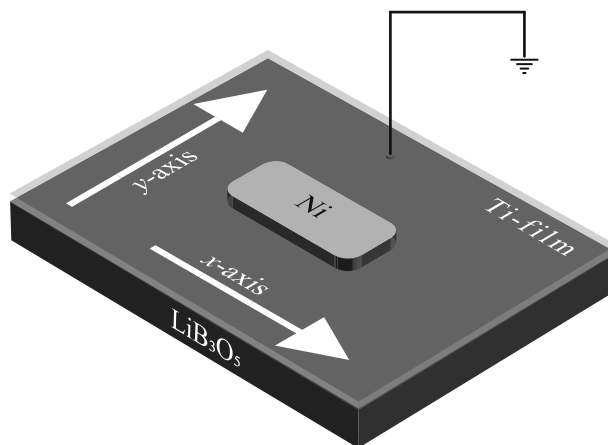


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема расположения исследуемых Ni частиц на монокристаллической подложке LiB₃O₅

должна была составлять $\varepsilon = ((\alpha_x - \alpha_p) - (\alpha_z - \alpha_p)) \times \Delta T = 7.4 \cdot 10^{-5} \cdot \Delta T$. Если принять модуль Юнга Ni равным $E = 210$ ГПа, согласно [5], то термоиндуцируемое одноосное механическое напряжение должно было составить $\sigma = 15.5 \cdot \Delta T$ МПа. За счет отрицательной константы магнитострикции Ni растяжение частиц должно приводить к созданию оси наведенной магнитной анизотропии в направлении, перпендикулярном этому растяжению.

Для изучения влияния термоиндуцированных механических деформаций на величину поля переключения субмикронных Ni частиц было выполнено два типа экспериментов. Под полем переключения подразумевалась такая величина внешнего магнитного поля, при которой направление квазиоднородной намагниченности частицы разворачивается на 180° . На получаемых MCM изображениях состоянию квазиоднородной намагниченности соответствуют светлая и темная области над магнитными полюсами частицы. При изменении направления квазиоднородной намагниченности на противоположное MCM изображение частицы инвертируется (рис. 3, 4).

В первом типе экспериментов фиксировалась температура образца и выполнялось предварительное намагничивание всех частиц полем -20 мТл. Затем выставлялось нулевое поле и проводилось увеличение его значения в противоположном направлении с шагом 1 мТл. На каждом шаге получалось MCM изображение образца и анализировалась магнитная структура частиц. Поле увеличивалось до изменения направления намагниченности всех частиц на противоположное. Затем температура образца увеличивалась на 5°C и цикл измерений с протяжкой по полю повторялся. Диапазон изменения температуры образца составил 25 – 50°C . Количество сформированных частиц, их соответствие заданным размерам и их расположение в области, доступной для MCM сканирования, привели к тому, что одновременно проводилось наблюдение за намагниченностью 15 частиц. На рисунке 3а приведено MCM изображение 3 субмикронных Ni частиц в нулевом поле после процесса их намагничивания. У каждой частицы наблюдается характерное изображение, которое соответствует состоянию с квазиоднородной намагниченностью, направленной вдоль длинной стороны частицы. При этом темная область соответствует одному полюсу частицы, а светлая – другому. При определенном значении внешнего магнитного поля (при температуре образца 35°C и поле $+10$ мТл) этот контраст изменяется на противоположный (рис. 3б), что соответствует изменению направления намагниченности частиц на противоположное. Как показали про-

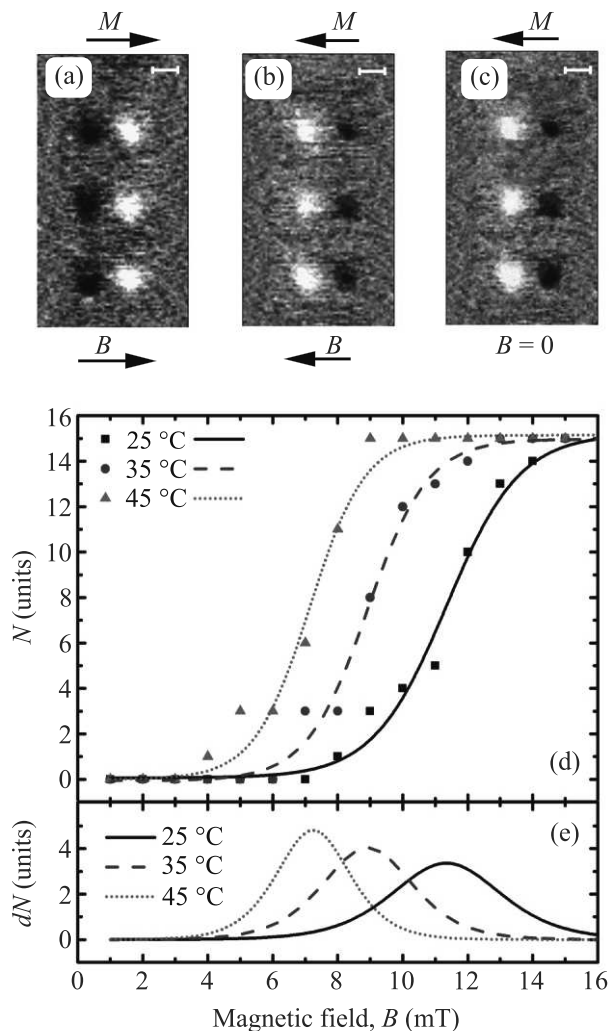


Рис. 3. (Цветной онлайн) MCM изображения трех Ni частиц: в поле 0 мТл (после намагничивания в поле -20 мТл) при температуре образца 35°C (а); в поле $+10$ мТл при температуре образца 35°C (б); в поле 0 мТл после понижения температуры до 25°C (с). Длина размерного бара составляет 500 нм. Стрелками показано направление внешнего магнитного поля B и намагниченности M в частицах. Зависимости количества частиц (N), изменивших направление намагниченности, от внешнего магнитного поля и температуры структуры (d). Фигурами (треугольник, круг, квадрат) показаны экспериментальные данные, линиями – результаты фитинга для соответствующих температур. Зависимости увеличения количества перемагнитившихся частиц (dN , представляет собой производную аппроксимационных кривых рис. 3d) от внешнего магнитного поля при разных температурах (e)

веденные измерения, это направление намагниченности частиц сохраняется после их охлаждения до комнатной температуры и выключения внешнего поля (рис. 3с).

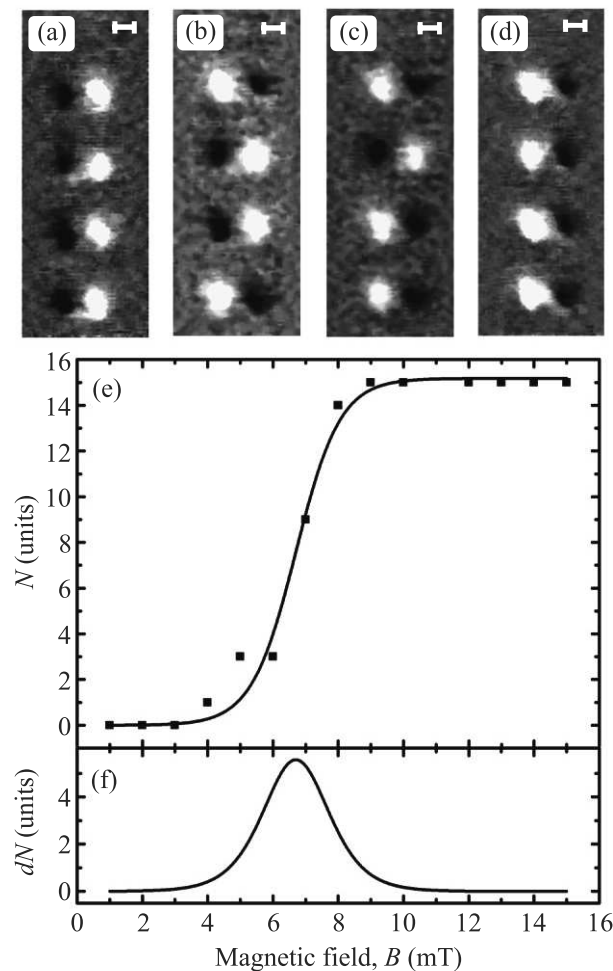


Рис. 4. (Цветной онлайн) МСМ изображение 4-х Ni частиц, полученные при 25 °С в поле 0 мТл: после намагничивания полем –20 мТл при 25 °С (а); после нагрева до 45 °С и охлаждения в поле +5 мТл (b); после нагрева до 45 °С и охлаждения в поле +7 мТл (с); после нагрева до 45 °С и охлаждения в поле +9 мТл (d). Длина размерного бара составляет 500 нм. Зависимость количества частиц (N), изменивших направление намагниченности, от величины поля, в котором образец нагревался до 45 °С и охлаждался до 25 °С (е). Фигурой (квадрат) показаны экспериментальные данные, линией – результат фитинга. Зависимость увеличения количества переманитившихся частиц (dN), представляет собой производную аппроксимационной кривой (е) от внешнего магнитного поля (f)

Подсчет количества переключившихся частиц позволил составить графики зависимости поля переключения частиц от внешнего магнитного поля и температуры (рис. 3d) и определить среднее значение поля переключения частиц. Для наглядности на рис. 3d,е приведены результаты только для трех температур: 25, 35 и 45 °С. Так как количество

измеряемых частиц было небольшим, и они имели разброс по размерам, то для усреднения полученных значений проводилась аппроксимация этих данных функцией $Y = a/(1 + b \cdot \exp(-k \cdot X))$. Далее эта кривая дифференцировалась и по максимуму производной определялось среднее значение поля переключения частиц при данной температуре (рис. 3е). Зависимость поля переключения частиц от температуры образца представлена в виде табл. 1. Согласно полученным данным, поле переключения частиц изменяется только в определенном диапазоне температур (30–45 °С) и при нагреве на 15 °С снижается на 4 мТл или в 1.57 раз. Также важно отметить, что с ростом температуры снижается разброс по полю переключения частиц (рис. 3е).

Таблица 1. Зависимость поля переключения субмикронных Ni частиц от температуры образца

Температура образца (°С)	25	30	35	40	45	50
Поле переключения (мТл)	11	11	9	8	7	7

При температурах выше 45 °С дальнейшего снижения поля переключения не наблюдается. По всей видимости, это связано с тем, что наводимая магнитоупругая анизотропия, направление которой перпендикулярно направлению внешнего магнитного поля, начинает препятствовать процессу переключения намагниченности. Следовательно, дальнейшее увеличение температуры образца становится нецелесообразным для снижения поля переключения частиц (при условии, что мы не хотим близко приближаться к температуре Кюри). Иными словами, величина наводимых механических напряжений в частице не должна превышать определенного значения (в нашем случае 0.15 ГПа). Поэтому при поисковых исследованиях влияния термоиндуцированного магнитоупругого эффекта на поле переключения частиц лучше использовать подложки, где механическая деформация увеличивается плавно при росте температуры (подложки, размер которых изменяется за счет разницы в термических коэффициентах расширения), а не наводится скачком (подложки, размер которых изменяется за счет фазового перехода) [16–18].

Во втором типе экспериментов производилось изменение температуры образца при фиксированном значении внешнего магнитного поля. На первом этапе частицы также намагничивались полем –20 мТл при температуре 25 °С, затем выставлялось определенное значение внешнего магнитного поля и производился цикл нагрева (до 45 °С) и охлаждения

(до 25 °C) образца. После охлаждения магнитное поле устанавливалось равным 0 мТл и получалось МСМ изображение образца (рис. 4а–д). Затем частицы приводились в исходное состояние за счет намагничивания в поле –20 мТл, величина внешнего магнитного поля увеличивалась на 1 мТл и цикл нагрева/охлаждения повторялся. Магнитное поле в данных экспериментах также было направлено вдоль длинной стороны частиц. Такой тип эксперимента может служить хорошим начальным приближением процесса записи информации методом HAMR. Как и в экспериментах первого типа при 45 °C, процесс переключения направления намагниченности частиц начинался при значении поля +4 мТл, когда изменялось направление намагниченности первой частицы из наблюдаемого массива. При последующем увеличении внешнего поля наблюдалось переключение направления намагниченности все большего числа частиц, которое сохранялось после остывания образца и выключения поля (рис. 4б, с). Поля в +9 мТл и цикла нагрева/охлаждения образца оказалось достаточно для изменения направления намагниченности всех частиц (рис. 4д). В результате обработки МСМ данных была получена зависимость количества частиц, изменивших направление намагниченности на противоположное при цикле нагрева/охлаждения от величины приложенного магнитного поля (рис. 4е). Среднее значение поля переключения частиц определялось, как и в экспериментах первого типа: производилось дифференцирование полученной кривой аппроксимации. По максимуму производной определялось среднее значение поля переключения частиц (рис. 4ф), которое с точностью до шага по полю составило 7 мТл. Полученное значение совпадает со средним значением поля переключения частиц при 45 °C, полученным в экспериментах первого типа.

Таким образом, за счет термоиндуцированного магнитоупругого эффекта в субмикронных прямоугольных частицах Ni, сформированных на поверхности трибората лития, можно существенно снизить (более чем в полтора раза) поле переключения направления намагниченности частиц при изменении температуры подложки всего на 15 °C. При использовании изотропных подложек для этого необходимо нагреть образец более чем на 200 °C. Триборат лития, за счет большой разницы в коэффициентах термического расширения по разным кристаллографическим осям и связанной с этим возможности наводить большие одноосные механические напряжения в частицах, может стать перспективной подложкой для создания в исследуемых объектах одноосных термоиндуцированных механических напряже-

ний и управления таким образом их магнитными свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 23-29-00085).

1. M. H. Kryder, E. C. Gage, T. W. McDaniel, W. A. Challener, R. E. Rottmayer, G. Ju, Y.-T. Hsia, and M. F. Erden, *Proceedings of the IEEE* **96**(11), 1810 (2008); DOI: 10.1109/JPROC.2008.2004315.
2. C. Vogler, C. Abert, F. Bruckner, D. Suess, and D. Praetorius, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 102406 (2016); DOI: 10.1063/1.4943629.
3. W.-H. Hsu and R. H. Victora, *JMMM* **563**, 169973 (2022); DOI: 10.1016/j.jmmm.2022.169973.
4. Н. И. Нургазизов, Т. Ф. Ханипов, Д. А. Бизяев, А. А. Бухараев, А. П. Чукланов, *ФТТ* **56**(9), 1756 (2014) [N. I. Nurgazizov, T. F. Khanipov, D. A. Bizyaev, A. A. Bukharaev, and A. P. Chuklanov, *Phys. Solid State* **56**(9), 1817 (2014); DOI: 10.1134/S1063783414090212.
5. А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др. (Collaboration), *Физические величины: Справочник*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат. М. (1991), 1232 с.
6. Y. Liu, Q. Zhan, G. Dai, Xi. Zhang, B. Wang, G. Liu, Zh. Zuo, X. Rong, H. Yang, Xi. Zhu, Y. Xie, B. Chen, and R.-W. Li, *Sci. Rep.* **4**, 6925 (2014); DOI: 10.1038/srep06925.
7. D. A. Bizyaev, A. A. Bukharaev, N. I. Nurgazizov, A. P. Chuklanov, and S. A. Migachev, *Phys. Status Solidi RRL* **14**(9), 2000256 (2020); DOI: 10.1002/pssr.202000256.
8. Р. В. Горева, О. Г. Удалов, *ФТТ* **61**(9), 1614 (2019); DOI: 10.21883/FTT.2019.09.48099.02N.
9. N. A. Usov, C.-R. Chang, and Z.-H. Wei, *J. Appl. Phys.* **89**, 7591 (2001); DOI: 10.1063/1.1357133.
10. А. А. Бухараев, А. К. Звездин, А. П. Пятаков, Ю. К. Фетисов, *УФН* **188**, 1288 (2018); DOI: 10.3367/UFNr.2018.01.038279 [A. A. Bukharaev, A. K. Zvezdin, A. P. Pyatakov, and K. Fetisov, *Phys.-Uspekhi* **61**, 1175 (2018)]; DOI: 10.3367/UFNe.2018.01.038279.
11. S. Bandyopadhyay, J. Atulasimha, and A. Barman, *Appl. Phys. Rev.* **8**, 041323 (2021); DOI: 10.1063/5.0062993.
12. Н. И. Нургазизов, Д. А. Бизяев, А. А. Бухараев, А. П. Чукланов, В. Я. Шур, А. Р. Ахматханов, *ФТТ* **65**(6), 955 (2023); DOI: 10.21883/FTT.2023.06.55650.07H.
13. К. П. Белов, *Магнотриксционные явления и их технические приложения*, Наука, М. (1987), 160 с.
14. V. L. Mironov and O. L. Ermolaeva, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **3**(5), 840 (2009); DOI: 10.1134/S1027451009050292.

15. N. D'Souza, M.S. Fashami, S. Bandyopadhyay, and J. Atulasimha, *Nano Lett.* **16**, 1069 (2016); DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b04205.
16. J. De Venta, S. Wang, T. Saerbeck, J.G. Ramirez, I. Valmianski, and I.K. Schuller, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 62410 (2014); DOI: 10.1063/1.4865587.
17. R.F. Need, J. Lauzier, L. Sutton, B.J. Kirby, and J. de la Venta, *APL Mater.* **7**, 101115 (2019); DOI: 10.1063/1.5118893.
18. V. Gorige, A. Swain, K. Komatsu, M. Itoh, and T. Taniyama, *Phys. Status Solidi RRL* **11**, 1700294 (2017); DOI: 10.1002/pssr.201700294.

Структурные и диффузионные свойства дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития на основе метода молекулярной динамики¹⁾

В. Г. Лукьянчук^{+,*2)}, А. В. Ланкин^{*,+2)}, Г. Э. Норман^{×,++2)}

⁺Московский физико-технический институт (государственный университет), 141700 Долгопрудный, Россия

^{*}Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

[×]Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 августа 2023 г.

После переработки 20 сентября 2023 г.

Принята к публикации 26 сентября 2023 г.

Построена атомистическая модель дегидратированного хлорсодержащего двойного слоистого гидроксида алюминия и лития $\text{Li} \cdot \text{Al}_2(\text{OH})_6\text{Cl}$, ДГАЛ-Cl, перспективного вещества для сорбции лития из бедных рассолов. Найдены эффективные заряды атомов системы методом DDEC6 (Density Derived Electrostatic and Chemical approach). Проведен молекулярно-динамический анализ ДГАЛ-Cl на основе построенной модели. Рассчитаны структурные характеристики трех пар атомов в металлических слоях ДГАЛ-Cl и распределение плотности вероятности атомов в направлении перпендикулярном к этим слоям. Получена температурная зависимость коэффициента диффузии атомов лития в пространстве между металлическими слоями в диапазоне 325–450 К.

DOI: 10.31857/S1234567823200107, EDN: orlkr

1. Введение. Статья посвящена разработке атомистической модели дегидратированного $\text{Li} \cdot \text{Al}_2(\text{OH})_6\text{Cl}$ (ДГАЛ-Cl). Модель проверена по структурным и диффузионным свойствам.

Как показывают ранние исследования, использование ДГАЛ-Cl, относящегося к классу двойных слоистых гидроксидов, является перспективным методом добычи ключевого компонента современных аккумуляторов лития из бедных рассолов [1–4]. Показано, что ДГАЛ-Cl способен сорбировать до 91 % ионов лития из искусственного рассола с высокой селективностью по отношению к ионам Na и K [5–7]. К иным преимуществам можно отнести низкую стоимость производства и отсутствие токсичных выбросов.

Существенным недостатком, однако, является условная стабильность данного вещества, которая существенно зависит от концентрации LiCl в рассоле. Тем не менее, термодинамическая стабильность ДГАЛ-Cl может быть повышена путем допирования ионами Fe^{3+} [8], что говорит о возможности

дальнейшей структурной модификации с целью увеличения стабильности и эффективности сорбции.

Методы компьютерного моделирования могут пролить свет на процессы интерколяции ионов Li из раствора на атомарном уровне, тем самым дополняя экспериментальный подход в поиске возможных путей модификации кристаллической структуры.

Квантово-механические расчеты с применением метода функционала электронной плотности (DFT) успешно использовались для моделирования двойных слоистых гидроксидов [10, 11]. Однако метод молекулярной динамики, широко применяемый для многих задач [12–17], сталкивался с трудностями из-за отсутствия подходящего потенциала. Использование общепринятого силового поля ClayFF [18, 19] могло приводить к выбросу металлических ионов из слоев в межслоевое пространство, что разрушало структуру LDH [20, 21].

Реакционные силовые поля (ReaxFF [22, 23]), хотя и приближены по точности к DFT, не позволяют моделировать длительные атомарные процессы в ДГАЛ-Cl [24]. Также существует силовое поле LDHFF [25], которое хорошо описывает октаэдрическую структуру ламелей в течение длительного времени, но его сложность и явное задание неразрушимых связей ограничивают его применимость в широком классе задач.

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: lukianchuk.vg@phystech.edu; alex198508@yandex.ru; norman@ihed.ras.ru

Таким образом, было решено выбрать ClayFF ввиду его популярности при моделировании глинистых веществ и простоты, которая дает широкие возможности для его модификации [26] под конкретный тип материалов, в том числе и двойных слоистых гидроксидов [27]. Количество молекул воды в элементарной ячейке ДГАЛ-С1 может существенно варьироваться, поэтому для простоты в данной работе рассматривается дегидратированный ДГАЛ-С1.

Настоящая работа посвящена созданию модели дегидратированного ДГАЛ-С1, а также расчету его структурных и диффузионных свойств. В пункте 2 приводится описание модели взаимодействия атомов, а также путь ее модификации, в пункте 3 описываются параметры моделирования. В пунктах 4 и 5 представлены результаты расчета структурных и диффузионных свойств, а также сравнение с экспериментами и расчетами других авторов.

2. Построение силового поля. Силовое поле ClayFF [18, 19] имеет вид:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{Coulombic}} + E_{\text{VDW}} + E_{\text{bond stretch}} + E_{\text{angle bend}},$$

где

$$E_{\text{Coul}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}},$$

$$E_{\text{VDW}} = \sum_{i \neq j} D_{o,ij} \left[\left(\frac{R_{o,ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{o,ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

$$E_{\text{bond stretch}} = \sum_{\text{bonds}} k_1 (r_{ij} - r_0)^2,$$

$$E_{\text{angle bend}} = \sum_{\text{angles}} k_2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2.$$

Здесь r_{ij} – расстояние между частицами, E_{total} – полная энергия, представленная в виде суммы кулоновской $E_{\text{Coulombic}}$, ван-дер-ваальсовой E_{VDW} энергий с константами взаимодействия $D_{o,ij}$, $R_{o,ij}$ и эффективными электрическими зарядами q_i , q_j , а также гармонических энергий $E_{\text{bond stretch}}$ и $E_{\text{angle bend}}$ для жесткого определения ковалентной связи в гидроксильной группе ОН и угла изгиба М–О–Н (М – металлический ион) с константами k_1 , r_0 и k_2 , θ_0 соответственно.

Для пересчета эффективных зарядов был использован алгоритм DDEC6, реализованный в программном пакете Chgemo Program [28, 29]. В отличие от алгоритма DMol [30], использовавшегося при разработке оригинального ClayFF, DDEC6 более локален, что в случае некоторых веществ может существенно влиять на общее качество модели.

Для сравнения также были проведены расчеты эффективных зарядов более старым по сравнению с DDEC6 (2016 г.) методом Бадера (2009 г.) [31] (см. табл. 1) – заряды существенно отличаются как от ClayFF, так и DDEC6 для всех атомов, кроме Li. Кроме того, заряд кислорода получился почти в 2 раза больше, чем у популярных трехточечных моделей воды TIP3P, SPC и SPC/E [32]. Хотя молекулярно-динамическая модель на бадеровских зарядах и демонстрировала стабильность структуры в течение нескольких наносекунд моделирования, было решено сосредоточиться на параметризации DDEC6 ввиду преимущества в эффективных зарядах с ClayFF для атомов Al, O и H, что указывает на корректность применения других констант взаимодействия.

Таблица 1. Параметры силового поля оригинального ClayFF и полученных модификаций. Погрешности в последнем знаке связаны с флуктуациями алгоритма DDEC6

Параметр	ClayFF	DDEC6	Бадер
$q_{\text{Li}}, [e]$	0.525	0.828	0.877
$q_{\text{Al}}, [e]$	1.575	1.775	2.933
$q_{\text{O}}, [e]$	−0.950	−1.035	−1.659
$q_{\text{H}}, [e]$	0.420	0.401	0.662
$q_{\text{Cl}}, [e]$	−1.00	−0.575	−0.756
k_1 (ккал/моль $\text{\AA}^2$)	554.1349		
k_2 (ккал/моль рад^2)	30.0	—	—

Плотность валентных электронов, необходимая для пересчета зарядов, рассчитывалась методом функционала электронной плотности в Quantum Espresso [33] на основе структуры, полученной нейтронной дифракцией для дегидратированного ДГАЛ-С1 [9].

Итоговые параметры силового поля приведены в табл. 1. В итоговом силовом поле также отсутствует угловое гармоническое взаимодействие М–О–Н. Как показала практика, его присутствие приводит к разрушению структуры при нагреве до 300 К (см. рис. 1, левая часть) и отсутствию межламельного перехода ионов Li. Наибольшее изменение эффективных зарядов заметно для ионов Li и Cl, что ожидаемо, так как именно в наличии этих ионов заключается отличие ДГАЛ-С1 от стабильного гиббсита $\text{Al}(\text{OH})_3$, на описание структурных свойств которого ClayFF и был изначально параметризован [19].

Расчет молекулярной динамики производился в пакете LAMMPS [34]. Итоговую моделируемую структуру можно увидеть на рис. 1, правая часть.

3. Процедура моделирования. Элементарная ячейка с экспериментально определенными положениями атомов была размножена в $7 \times 7 \times 2$ раз,

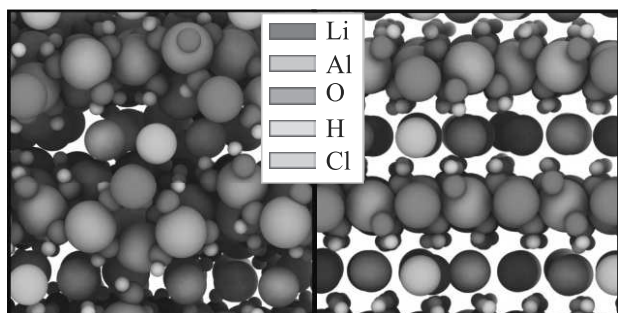


Рис. 1. (Цветной онлайн) Срез моделируемой структуры для оригинального ClayFF (слева) и нашей модификации (справа) при 300 К после 1 нс расчета

таким образом, вычислительная ячейка содержала 3136 атомов. Процесс нагрева от 0 до 300 К производился в анизотропном *NPT* ансамбле с использованием термостата и баростата Нозе–Гувера в течение 300 пс при единичном давлении. В дальнейшем запускались расчеты длиной в 5–20 нс в ансамбле, зависящем от исследуемой характеристики. Такой подход позволял достигать близкого к равновесному состояния вне зависимости от смены ансамбля (см. рис. 2). Расчет среднеквадратичного смещения (RMSD) производился по следующей стандартной формуле:

$$\text{RMSD}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)\|^2}.$$

На рисунке 2 виден резкий скачок от нуля на самых первых шагах интегрирования. В дальнейшем система приходит в одно и то же среднее состояние вне зависимости от ансамбля – это свидетельствует о корректной процедуре выхода на равновесие.

Для анализа распределения плотности и радиальных функций распределения использовался ансамбль *NPT*, чтобы соответствовать реальным условиям. В то же время диффузия атомов лития в межламельном пространстве была изучена как в ансамбле *NPT*, так и в ансамбле *NVE*. Такой подход позволяет оценить влияние баростата на характеристики диффузии в системе. Средние параметры были вычислены на основе последних половин траекторий с целью не учитывать участок выхода на равновесие.

Для определения средних параметров элементарной ячейки был произведен анизотропный расчет в *NPT* со свободными углами.

4. Структурные свойства модели. Распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* приведено на рис. 3. Из распределения видно, что самыми локализованными частицами в системе явля-

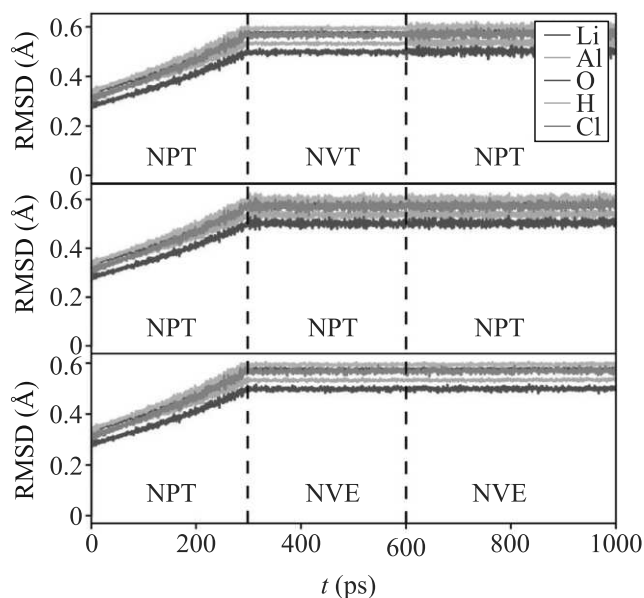


Рис. 2. Зависимость RMSD от времени для вычислений в различных комбинациях ансамблей

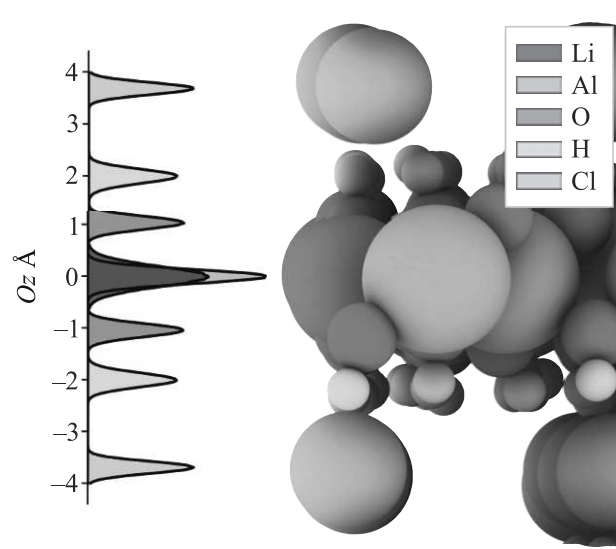


Рис. 3. (Цветной онлайн) Усредненное распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* для одной ламели

ются ионы алюминия и лития, что говорит о стабильности ламели. Также заметно, что пик лития шире пика алюминия – это может объясняться меньшей энергией связи атома лития с кристаллической структурой. Примерно равный по высоте с литиевым пиком пик хлора свидетельствует об относительно сильной локализации атома хлора в положении равновесия, что согласуется с экспериментальными данными касательно анионов в межламельном пространстве [4, 9].

Сравнение парциальных радиальных функций распределения для трех пар атомов с экспериментальными данными приведено на рис. 4. Для наглядности совпадения формы экспериментальных и вы-

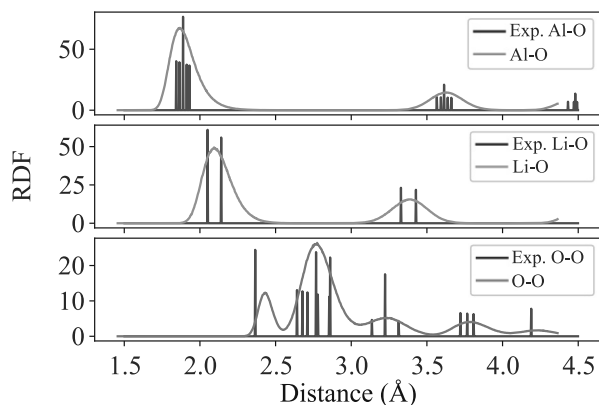


Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальные радиальные функции распределения. Для экспериментальных данных [9] разница высот определяется относительной частотой попадания атомов в координационную сферу

численных данных масштаб по Ox для RDF модели был домножен на характерное изменение длины, связанное с разностью плотностей модели и реальной структуры, равное 0.97. Качественно форма радиальной функции распределения совпадает с экспериментальными пиками, хотя в модели атомы в среднем отделились друг от друга. Этот результат ожидаем, так как равновесная элементарная ячейка получилась шире по Oz , чем экспериментальная, т.е. в полученной модели наблюдается излишнее отталкивание ламелей друг от друга. Более глубокое понимание отличий и сходств модели с экспериментальными данными дает анизотропный расчет со свободными углами вычислительной ячейки в NPT ансамбле (см. табл. 2).

Как видно из табл. 2, модель не сохраняет реальную плотность из-за слишком сильного отталкивания ламелей друг от друга. Тем не менее углы элементарной ячейки равны экспериментальным, величина погрешности в основном связана с малым количеством частиц в расчете и длиной траекторий.

5. Диффузионные свойства модели. В данном пункте один из атомов лития был помещен в несоседнее к родной ламели межламеллярное пространство. Такая процедура обусловлена важностью сохранения электронейтральности системы и обусловлена допущением, что удаление атома лития на расстояние в несколько ламелей (в данном случае примерно 15 Å) нивелирует влияние заряженной родной ламели.

Методы молекулярной динамики широко при-

Таблица 2. Сравнение параметров элементарной ячейки для полученной модели в анизотропном расчете со свободными углами с экспериментальными данными

Параметр	Эксперимент [9]	Эта работа
a (Å)	5.1	5.17 ± 0.01
b (Å)	5.1	5.17 ± 0.01
c (Å)	14.3	16.01 ± 0.01
α (°)	90	89.9 ± 0.3
β (°)	90	90.0 ± 0.3
γ (°)	120	120.0 ± 0.1
V (Å ³)	322.1	369 ± 2
ρ (г/см ³)	2.04	1.78 ± 0.01

меняются для расчета диффузии в твердых телах [35–39] и жидкостях [40–46]. Для расчета двумерной диффузии применяется формула Эйнштейна–Смолуховского:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle [\mathbf{r}_{i,a}(t) - \mathbf{r}_{i,a}(0)]^2 \rangle = 2dD_a t,$$

где i, a – индекс и тип частицы, d – размерность пространства движения, D_a – коэффициент диффузии, t – время.

На рисунке 5 изображена кривая, демонстрирующая зависимость коэффициента диффузии от температуры. Видно, что наблюдается согласованность динамических характеристик с результатами, полученными методом квантовой молекулярной динамики в работе [11]. Начиная с температуры 350 К (температура синтеза ДГАЛ-Cl [24]), для атомов лития проявляется межламеллярная подвижность за счет выбивания другого атома лития из ламели. При температуре 500 К было затруднительно получить достаточное количество данных о диффузии из-за быстрой рекомбинации искусственной вакансии, связанной с ограниченным размером моделируемой системы. При экстраполяции же данных до температуры 500 К выявляется различие, вероятно, обусловленное недооценкой плотности в нашей модели. Расчет диффузии при больших температурах был затруднен, так как начиная с 350 К (это температура синтеза ДГАЛ-Cl [24]), исходный атом быстро встраивается в ближайший слой, выбивая оттуда другой атом лития.

Также из левой вставки на рис. 5 можно качественно оценить влияние NPT ансамбля на диффузионный процесс: коэффициент диффузии не поменялся, но возник участок, отвечающий “замедлению” атома лития – связанное со случайными флуктуациями расхождение, которое должно исчезать при увеличении выборки усредняемых траекторий. Это указывает на статистическую незначимость влияния баростата и термостата на систему и то, что даль-

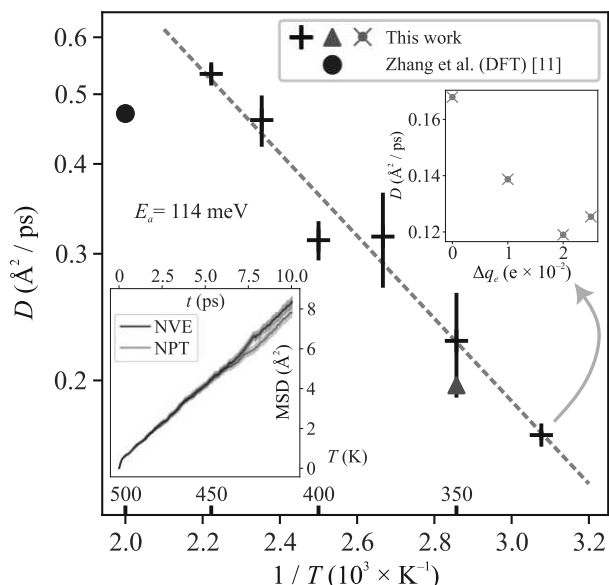


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента диффузии атома лития в межламельном слое от обратной температуры в логарифмическом масштабе и линейная регрессия. Треугольным маркером обозначен расчет при большем числе частиц. На вставке слева среднее квадратичное отклонение атома лития в межламельном слое для ансамблей *NVE* и *NPT* при $T = 300$ К. Полупрозрачное обрамление линий отвечает среднему квадратичному отклонению при подсчете MSD. На вставке справа зависимость коэффициента диффузии от изменения зарядов пары *Li–Cl*

нейшие расчеты диффузии в уже гидратированном ДГАЛ-Сл можно производить в *NPT* ансамбле с поправкой на этот эффект.

С целью проверки устойчивости результатов статьи к малым вариациям зарядов были проведены расчеты коэффициента диффузии лития при 325 К при измененных эффективных зарядах в паре *Li–Cl* (см. правую вставку рис. 5). Для поддержания электронейтральности системы заряды q_{Li} и q_{Cl} соответственно увеличивались и уменьшались на Δq_e в пределах 5 % от их оригинального значения. В результате коэффициент диффузии постепенно уменьшался до 75 % от своей изначальной величины, что говорит об относительно сильном влиянии точных значений эффективных зарядов на свойства системы.

Также при 350 К был проведен расчет с большим числом частиц (7776 атомов) с целью оценки влияния числа частиц на измеряемые характеристики. Как видно из рис. 5, полученные коэффициенты диффузии находятся в пределах погрешности, что говорит о достаточном размере системы.

Энергию активации можно оценить из темпе-

ратурной зависимости коэффициента диффузии (рис. 5) по формуле

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{k_B T}}.$$

Получившиеся значение энергии активации оказалось равным 114 ± 8 мэВ, что соотносится с величиной потенциального барьера в межламельном пространстве в 177 мэВ, полученном методом функционала электронной плотности [11].

6. Заключение. В настоящей работе построена стабильная модель дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития (ДГАЛ-Сл). Вычислены структурные и диффузионные свойства ДГАЛ-Сл в рамках данной модели.

1. Репараметризованы эффективные заряды и убрано угловое взаимодействие *M–O–H* из потенциала ClayFF. Изменение заряда зависит от атома к атому: от 5 % для водорода до 60 % для лития. Такой подход позволяет воспроизвести стабильную во времени структуру ДГАЛ-Сл.

2. Распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* и радиальные функции распределения атомов в ламелях для пар *Al–O*, *Li–O* и *O–O* свидетельствуют о воспроизведении экспериментальной структуры ближнего порядка. Найдены положения максимумов и относительные высоты от первой до второй координационной сферы для пары *Li–O*, до третьей для *Al–O*, до пятой для *O–O*. Данные согласуются с экспериментом.

3. Вычислена температурная зависимость коэффициента диффузии межламельного лития в диапазоне 325–450 К, найдена энергия активации в 114 мэВ. Результаты согласуются с величиной потенциального барьера лития в межламельном пространстве, рассчитанной методом функционала электронной плотности [11].

4. Результаты позволяют сделать вывод о базовой возможности анализа свойств ДГАЛ-Сл при помощи молекулярной динамики на основе простых силовых полей. При этом сохраняются как структурные, так и диффузионные свойства материала. Это свидетельствует о применимости предложенного метода репараметризации зарядов для изучения потенциальных путей модификации структуры ДГАЛ-Сл.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства “Приоритет-2030” (соглашение 075-02-2021-1316 от 30.09.2021) – В. Г. Лукьянчук и А. В. Ланкин, и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание # 075-01129-23-00) – Г. Э. Норман.

Авторские расчеты в работе выполнены на кластере Лаборатории многомасштабного моделирования в физике мягкой материи МФТИ *Soft cluster*.

1. H. Bae and Y. Kim, *Mater. Adv.* **2**, 3234 (2021).
2. Y. Liu, B. Ma, Y. Lü, C. Wang, and Y. Chen, *Int. J. Miner. Metall. Mater.* **30**, 209 (2023).
3. A. Khalil, S. Mohammed, R. Hashaikh, and N. Hilal, *Desalination* **528**, 115611 (2022).
4. M. Lal and A. T. Howe, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **15**, 737 (1980).
5. M. P. Paranthaman, L. Li, J. Luo, T. Hoke, H. Ucar, B. A. Moyer, and S. Harrison, *Environ. Sci. Technol.* **51**, 13481 (2017).
6. А. Б. Алхасов, Д. А. Алхасова, А. Ш. Рамазанов, М. А. Каспарова, *Теплоэнергетика* **6**, 25 (2016).
7. А. Б. Алхасов, Д. А. Алхасова, А. Ш. Рамазанов, М. А. Каспарова, *Теплоэнергетика* **7**, 17 (2017).
8. L. Wu, L. Li, S. F. Evans, T. A. Eskander, B. A. Moyer, Z. Hu, P. J. Antonick, S. Harrison, M. P. Paranthaman, R. Riman, and A. Navrotsky, *J. Am. Ceram. Soc.* **102**, 2398 (2019).
9. A. V. Besserguenev, T. D. Dzhambazov, O. V. Magdysyuk, and P. G. Bruce, *Chem. Mater.* **9**, 241 (1997).
10. D. G. Costa, A. B. Rocha, R. Diniz, W. F. Souza, S. S. X. Chiaro, and A. A. Leitao, *J. Phys. Chem. C* **114**, 14133 (2010).
11. Y. Zhang, X. Cheng, C. Wu, J. Köhler, and S. Deng, *Molecules* **24**, 2667 (2019).
12. Н. Д. Кондратюк, В. В. Писарев, *УФН* **193**, 437 (2023).
13. Н. М. Щелкачев, Р. Е. Рыльцев, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 732 (2015).
14. В. Р. Белослудов, К. В. Гец, Р. К. Жданов, Ю. Ю. Божко, Р. В. Белослудов, Л.-Дж. Чен, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 144 (2022).
15. Е. О. Хазиева, Н. М. Щелкачев, А. О. Типеев, Р. Е. Рыльцев, *ЖЭТФ* **164** (2023), принята в печать.
16. J. Chen and L. Li, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 119 (2020).
17. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН* **190**(5), 449 (2020).
18. R. T. Cygan, J. J. Liang, and A. G. Kalinichev, *J. Phys. Chem. B* **108**, 1255 (2004).
19. R. T. Cygan, J. A. Greathouse, and A. G. Kalinichev, *J. Phys. Chem. C* **125**, 17573 (2021).
20. N. Kim, A. Harale, T. T. Tsotsis, and M. Sahimi, *J. Chem. Phys.* **127**, 224701 (2007).
21. G. M. Lombardo, G. C. Pappalardo, F. Punzo, F. Costantino, U. Costantino, and M. Sisani, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 5026 (2005).
22. A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard III, *J. Phys. Chem. A* **105**, 9396 (2001).
23. T. P. Senftle, S. Hong, M. M. Islam, S. B. Kylasa, Y. Zheng, Y. K. Shin, C. Junkermeier, R. Engel-Herbert, M. J. Janik, H. M. Aktulga, T. Verstraelen, A. Grama, and A. C. T. van Duin, *npj Comput Mater* **2**, 15011 (2016).
24. I. Sissoko, E. T. Iyagba, R. Sahai, and P. Biloen, *J. Solid State Chem.* **60**, 283 (1985).
25. S.-T. Zhang, H. Yan, M. Wei, D. G. Evans, and X. Duan, *J. Phys. Chem. C* **116**, 3421 (2012).
26. E. V. Tararushkin, V. V. Pisarev, and A. G. Kalinichev, *Cement and Concrete Research* **156**, 106759 (2022).
27. G. Pérez-Sánchez, T. L. P. Galvao, J. Tedim, and J. R. B. Gomes, *Appl. Clay Sci.* **165**, 164 (2018).
28. T. A. Manz and N. G. Limas, *RSC Adv.* **6**, 47771 (2016).
29. N. G. Limas and T. A. Manz, *RSC Adv.* **6**, 45727 (2016).
30. B. Delley, *J. Chem. Phys.* **113**, 7756 (2000).
31. W. Tang, E. Sanville, and G. Henkelman, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 084204 (2009).
32. M. Pekka and N. Lennart, *J. Phys. Chem. A* **105**, 9954 (2001).
33. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
34. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger et al. (Collaboration), *Comput. Phys. Commun.* **271**, 10817 (2022).
35. Е. А. Лобашев, А. С. Антропов, В. В. Стегайлов, *ЖЭТФ* **163**, 201 (2023).
36. A. Antropov and V. Stegailov, *J. Nucl. Mater.* **573**, 154123 (2023).
37. A. B. Belonoshko, J. Fu, and G. Smirnov, *Phys. Rev. B* **104**, 104103 (2021).
38. A. B. Belonoshko, S. I. Simak, W. Olovsson, and O. Yu. Vekilova, *Phys. Rev. B* **105**, L180102 (2022).
39. V. G. Baidakov and A. O. Tipeev, *J. Non-Cryst. Solids* **503-504**, 302 (2019).
40. N. D. Kondratyuk, G. E. Norman, and V. V. Stegailov, *J. Chem. Phys.* **145**, 204504 (2016).
41. N. Kondratyuk, D. Lenev, and V. Pisarev, *J. Chem. Phys.* **152**, 191104 (2020).
42. J. T. Bullerjahn, S. von Bülow, and G. Hummer, *J. Chem. Phys.* **153**, 024116 (2020).
43. D. M. Heyes, E. R. Smith, and D. Dini, *J. Chem. Phys.* **150**, 174504 (2019).
44. A. O. Tipeev, E. D. Zanotto, and J. P. Rino, *J. Phys. Chem. C* **122**, 28884 (2018).
45. V. I. Deshchenya, N. D. Kondratyuk, A. V. Lankin, and G. E. Norman, *J. Mol. Liq.* **367**, 120456 (2022).
46. О. В. Кашурин, Н. Д. Кондратюк, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман, *Журнал физической химии* **97**, 836 (2023).

Взаимодействие магнонных Бозе конденсатов в пленках железо-иттриевого граната через акустическую связь

Г. А. Князев⁺⁺, А. Н. Кузмичев⁺, П. Е. Петров⁺⁺, П. М. Ветошко^{+×°}, В. И. Белотелов^{+×*},
Ю. М. Буньков⁺¹⁾

⁺Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Москва, Россия

^{*}Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

[×]Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, 295007 Симферополь, Россия

[°]Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 сентября 2023 г.

После переработки 21 сентября 2023 г.

Принята к публикации 21 сентября 2023 г.

Экспериментально исследовано возбуждение магнонного Бозе конденсата в пленке железо-иттриевого граната через акустическую связь с конденсатом во втором образце. Показана нелинейная природа этого возбуждения. Предположено образование фононного Бозе конденсата в подложке. Данный эксперимент открывает возможности для создания кубитов на основе Бозе конденсатов, которые взаимодействуют акустически.

DOI: 10.31857/S1234567823200119, EDN: orlkyc

Исследования когерентного квантового состояния вещества имеют фундаментальное значение. Они проявляются в первую очередь в таких явлениях, как электронная сверхпроводимость и массовая сверхтекучесть. Непосредственно Бозе конденсация наблюдалась в разряженном газе атомов [1, 2], а также фотонов [3–5]. Кроме частиц, макроскопические квантовые состояния могут образовывать и квазичастицы – магноны [6], фононы [7], ротонны [8], экситоны [9], поляритоны [10], связанные экситон-поляритонные состояния [11] и т.д. В состоянии Бозе-Эйнштейновской конденсации макроскопическое число квазичастиц находится в едином квантовом состоянии. Оно возникает при возбуждении достаточного числа неравновесных квазичастиц и определяется известной формулой Бозе конденсации, в которую входят плотность, температура и масса квазичастиц.

Впервые сверхтекучее состояние квазичастиц – магнонов было обнаружено в 1984 г. в антиферромагнитном сверхтекучем $^3\text{He-B}$ [12–14]. Бозе конденсация магнонов (МБЭК) была обнаружена по спонтанному восстановлению их когерентности после расфазировки в сильно неоднородном магнитном поле [15, 16]. Сверхтекучие свойства МБЭК были также подтверждены экспериментально и детально ис-

следованы [17, 18]. Несмотря на то, что $^3\text{He-B}$ является сверхтекучей жидкостью, явление магнонной сверхтекучести связано непосредственно с магнитными свойствами этого антиферромагнетика, а не с его массовой сверхтекучестью. Поэтому аналогичные явления можно наблюдать и в твердотельных магнетиках, где подвижность магнонов осуществляется за счет их взаимодействия.

Образование аналогичного магнонного БЭК и спиновой сверхтекучести в твердотельных магнетиках было предсказано в системах со связанной ядерно-электронной прецессией в антиферромагнетиках [19] и обнаружено в CsMnF_3 [20] и MnCO_3 [21–24]. Настоящим прорывом стало обнаружение аналогичного явления в пленках железо-иттриевого граната (ЖИГ) при комнатной температуре [25, 26]. Магноны в пленках ЖИГ, намагниченных перпендикулярно плоскости образца, имеют минимум энергии при волновом векторе k , равном нулю. Они также характеризуются взаимодействием отталкивания, как и в $^3\text{He-B}$. Поэтому МБЭК образуется стационарными магнонами, как и в атомарном БЭК. Назовем его БЭК атомарного типа.

Кроме этого, другой тип Бозе конденсации магнонов был обнаружен в пленках ЖИГ, намагниченных в плоскости. В этом случае минимум энергии соответствует магнонам с ненулевым вектором k . При достаточной плотности возбужденных магнонов они

¹⁾e-mail: y.bunkov@rqc.ru

образуют Бозе конденсаты с $+k_{\min}$ и $-k_{\min}$ [27–29]. Вопрос о существовании магнной сверхтекучести в этом случае остается открытым, так как не была исследована ни длина когерентности, ни критическая величина сверхтекучего тока магнонов. В данной статье мы будем рассматривать только атомарный тип МБЭК, в котором минимум энергии соответствует квазичастицам с нулевым импульсом.

В связи с тем, что магноны являются квазичастицами в магнитоупорядоченных системах, их равновесная плотность определяется температурой системы. При этом она всегда меньше, чем концентрация магнонов, необходимая для Бозе конденсации. Однако их плотность можно существенно увеличить путем возбуждения неравновесных магнонов. Критическая концентрация магнонов для образования МБЭК для различных систем может быть вычислена из параметров спектра магнонов. Так, для рассматриваемой в данной статье системы, состоящей из пленки ЖИГ, намагниченной перпендикулярно поверхности, критическая плотность магнонов соответствует динамическому отклонению намагниченности на угол 2.5° [30]. В системе неравновесных магнонов роль плотности частиц $\mathcal{N}$ играет проекция полного спина на направление внешнего магнитного поля S_z . Возбуждение неравновесных магнонов приводит к уменьшению продольной намагниченности системы S_z на величину, пропорциональную $1 - \cos \beta$, где β – угол динамического отклонения равновесной намагниченности [31, 32]. Взаимодействие между магнонами приводит к сдвигу частоты прецессии от ларморовской на величину $\Delta\omega$, которая определяет длину когерентности и критическую скорость сверхтекучего тока магнонов [31, 32].

Большим достоинством магнной сверхтекучести является то, что данное состояние с отклоненной и прецессирующей намагниченностью является основным состоянием системы при заданной плотности магнонов. Поэтому его можно поддерживать непрерывно, возмещая испаряющиеся магноны внешней накачкой. При этом новые возбужденные магноны рождаются в состоянии уже существующего Бозе конденсата [33]. Более того, частота радиочастотной (РЧ) накачки определяет химический потенциал и соответствующую плотность неравновесных магнонов [6, 34]. Сканируя частоту (или магнитное поле) при постоянной РЧ накачке, возможно изменять плотность магнонов в конденсате [35].

Основным каналом релаксации магнонов в пленках ЖИГ является возбуждение фононов в подложке [36]. Скорость релаксации магнонов существенно ускоряется при условии, что частота магнитного ре-

зонанса совпадает с частотой акустической моды на толщине подложки [37]. Однако в данном исследовании был также обнаружен эффект антирезонанса, при котором скорость релаксации магнонов существенно замедлялась, когда их частота совпадала с серединой частот стоячих акустических мод, что говорит о когерентности магнон-фононного взаимодействия. Поэтому целью данного исследования является изучение взаимодействия магнонов в удаленных образцах за счет возбужденных фононов подложки.

МБЭК является макроскопическим квантовым состоянием, на основе которого можно построить вычислительные квантовые устройства, имеющие свойства кубитов. Их можно представить в виде двух МБЭК в двух магнитных дисках, связанных управляемой связью, которая может быть реализована при помощи радиочастотных фотонов, магнонов или фононов [38]. В эксперименте, представленном в данном письме, мы исследовали связь двух образцов пленок ЖИГ круглой формы диаметром 1 мм и толщиной 2 мкм, выращенных на расстоянии 4 мм на общей подложке из гадолиний-галлиевого граната (ГГГ) толщиной 0.5 мм.

Схема установки представлена на рис. 1. Установка является модификацией оптической установки, детальное описание которой представлено в [39, 40]. Магнитный резонанс в области одного из магнитных дисков возбуждался за счет полосковой линии. Величина прецессирующей намагниченности в нем измерялась лазерной системой с использованием эффекта Фарадея. Эта же система позволяла измерять амплитуду магнитного резонанса и во втором магнитном диске путем перемещения оптической системы вдоль оптической призмы ВК-7 по оси y , как показано на рис. 1. Мы обнаружили, что при возбуждении магнитного резонанса в одном из магнитных дисков наблюдался также сигнал прецессирующей намагниченности и во втором магнитном диске. В случае сдвига возбуждающего полоска на величину более 1 мм от накачиваемого магнитного диска сигнал пропадал в обоих магнитных дисках, что исключает возможность РЧ наводки между полосковой линией и удаленным магнитным диском.

На рисунке 2 показана амплитуда отклонения прецессирующей намагниченности в магнитном диске # 1 при РЧ накачке на частоте 2.4 ГГц как функция магнитного поля и мощности накачки. В пределе малой накачки мы видим образование линейного сигнала резонанса в поле 2435 Э и вторую моду резонанса в поле 2413 Э. При увеличении мощности накачки область образования резонанса резко увеличивается. При этом область отклонения намагниченности бо-

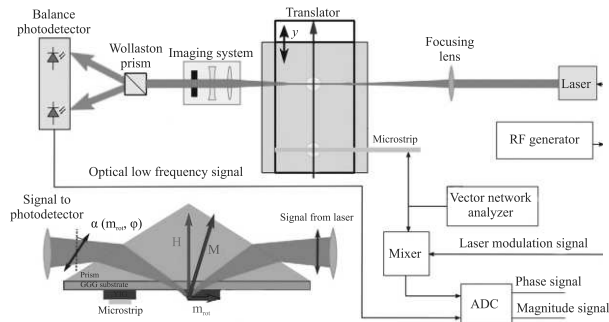


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. Сверху представлена оптическая схема, вид сверху, с РЧ частью; внизу слева – вид сбоку на оптическую призму с образцом и РЧ полоском, а также ориентации векторов поляризации лазерного излучения, внешнего магнитного поля H , намагниченности M и ее проекции m_{tot}

лее 3° соответствует концентрации магнонов, удовлетворяющей образованию МБЭК, как было показано в [40, 41] и соответствует теоретической модели [30]. При увеличении мощности накачки максимум сигнала МБЭК сдвигается в область меньших полей, что соответствует эффекту “foldover” [42]. Однако видно, что область резонанса в данной геометрии расширяется также и в область больших полей. Хорошо также заметно, что МБЭК основной моды резонанса поглощает вторую моду при мощности накачки, превышающей 5 дБм. Данная установка позволяет детально исследовать многие свойства МБЭК. В данной статье мы остановимся на характеристиках фоновонного взаимодействия между двумя магнитными дисками с МБЭК.

На рисунке 3 показана амплитуда отклонения прецессии намагниченности на втором магнитном диске при возбуждении МБЭК на первом магнитном диске. То есть возбуждение магнонов во втором магнитном диске происходит исключительно за счет фононов, сгенерированных МБЭК в первом магнитном диске, накачиваемом РЧ полоском. Локальное поле на втором магнитном диске слегка смещено, так что линейный резонанс при малой мощности формируется в поле 2444 Э. При мощности более 5 дБм образуется отклонение намагниченности более 3° , что должно соответствовать образованию МБЭК магнонов.

Проанализируем зависимость амплитуды прецессии во втором магнитном диске от ее амплитуды в первом магнитном диске при фиксированном магнитном поле. Результаты этого исследования показаны на рис. 4. В магнитном поле 2444 Э, соответствующем линейному резонансу на втором магнитном диске, амплитуды сигналов одинаковы до углов

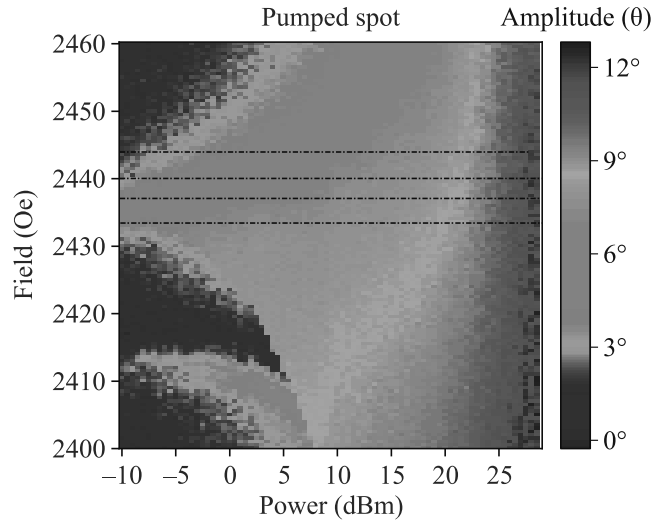


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение амплитуды угла прецессии намагниченности в зависимости от величины мощности РЧ накачки и значения внешнего магнитного поля H в магнитном диске, помещенном на РЧ полосок

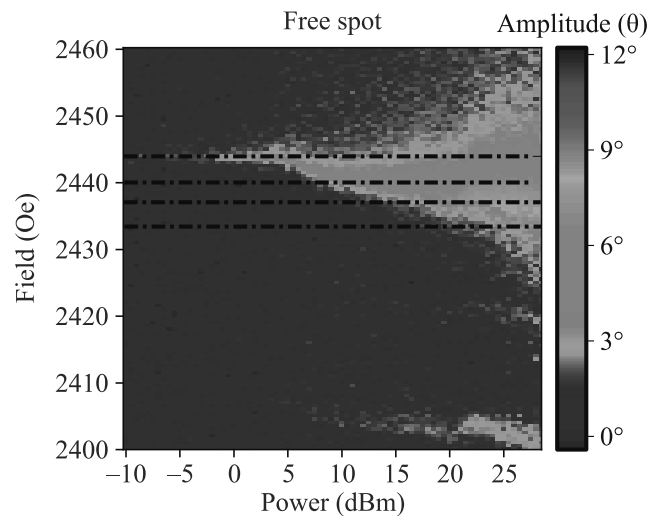


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение амплитуды угла прецессии намагниченности в зависимости от величины мощности РЧ накачки и значения внешнего магнитного поля H в магнитном диске, расположенном на расстоянии 3 мм от РЧ полоска

отклонения до 4° . Затем намагниченность во втором магнитном диске перестает отклоняться. При других полях прецессирующая намагниченность образуется пороговым образом при отклонении намагниченности в первом магнитном диске более 6° и достигает углов отклонения, соответствующих равновесно-му МБЭК при данном поле и частоте накачки.

Из полученных результатов мы можем сделать вывод, что образуется связанное магнон-фононное

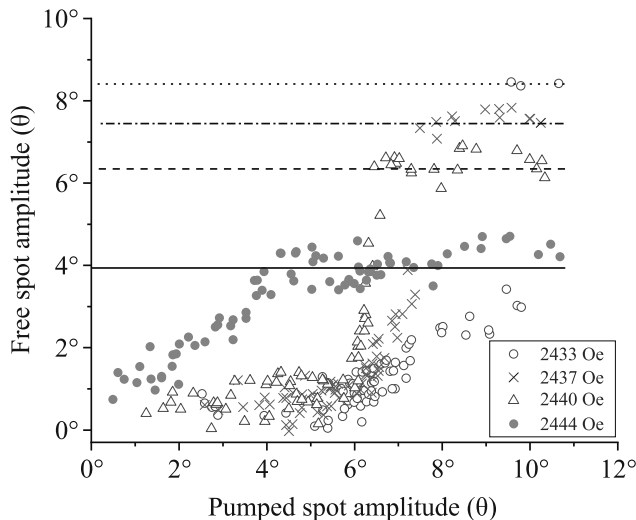


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость амплитуды угла прецессии намагниченности в свободном магнитном диске от амплитуды накачиваемого РЧ полоском магнитном диске для значений внешнего магнитного поля, соответствующих значениям 2433, 2437, 2440 и 2444 Э

состояние, причем фононы объединяют магнотонные подсистемы на больших расстояниях. Другими словами, МБЭК в пленке ЖИГ существует совместно с модами колебания фононов в подложке. Данный эксперимент ставит вопрос о когерентном состоянии фононов в подложке. Ранее возможность образования фононного Бозе конденсата исследовалась в ряде работ [7, 43]. Взаимодействие МБЭК и фононов детально исследовано для случая пленки ЖИГ, намагниченной в плоскости, когда и магнотонны, и фононы имеют ненулевой волновой вектор [44]. Однако возбуждение однородной прецессии фононами, насколько нам известно, не рассматривалось. Таким образом, благодаря представленным в этом письме экспериментальным результатам, мы можем поставить вопросы для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований связанных состояний фононов и магнотонного БЭК атомарного типа.

Одной из ключевых проблем для квантовых процессоров является время сохранения когерентности, непосредственно связанное с временами релаксации носителей. До сих пор считалось, что процессы релаксации магнотоннов определяются возбуждением фононов. Однако добротность фононной системы в пленках ЖИГ на несколько порядков выше, чем магнотоннов. Возникает возможность изготовления добротных фононных резонаторов, в которых энергия фононов не рассеивается, а возвращается в магнотонную подсистему, как это было впервые продемонстрировано в [37]. Кроме того, в работе показано, что фоно-

ны могут играть роль связи между двумя МБЭК с разными частотами в магнотонном макроскопическом кубите.

Эта работа финансировалась в рамках проекта # 22-12-00322 Российского научного фонда. Мы также благодарны Крымскому федеральному университету им. В. И. Вернадского, предоставившему нам образцы, изготовленные в рамках мегагранта # 075-15-2022-1108 Министерства науки и высшего образования РФ.

1. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthew, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 5221 (1995).
2. K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, M. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
3. J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger, and M. Weitz, *Nature* **468**, 545 (2010).
4. J. Schmitt, T. Damm, F. Vewinger, and M. Weitz, *Appl. Phys. B Laser Opt.* **105**, 17 (2011).
5. J. L. Figueiredo, J. T. Mendonça, and H. Terças, *Phys. Rev.* **108**, 013201 (2023).
6. G. E. Volovik, *J. Low Temp. Phys.* **153**, 266 (2008).
7. D. M. Stamper-Kurn, A. P. Chikkatur, A. Görlitz, S. Inouye, S. Gupta, D. E. Pritchard and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2876 (1999).
8. L. A. Melnikovsky, *Phys. Rev. B* **84**, 024525 (2011).
9. L. V. Butov, A. L. Ivanov, A. Imamoglu, P. B. Littlewood, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, K. L. Campman, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5608 (2001).
10. B. Deveaud-Pledran, *J. Opt. Soc. Am.* **29**, 1387145 (2012).
11. J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymaska, R. Andre, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud, and L. S. Dang, *Nature* **443**, 409 (2006).
12. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, *Письма в ЖЭТФ* **40**, 256 (1984).
13. И. А. Фомин, *Письма в ЖЭТФ*, **40**, 260 (1984).
14. Yu. M. Bunkov, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 164201 (2009).
15. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 164210 (2010).
16. Y. Bunkov, *J. Low Temp. Phys.* **185**, 399 (2016).
17. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1631 (1989).

18. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, *Spin superfluidity and magnon Bose-Einstein condensation*, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, *International Series of Monographs on Physics* **156**, 253 (2013).
19. Yu. M. Bunkov, *Phys.-Uspekhi* **53**, 848 (2010).
20. Yu. M. Bunkov, E. M. Alakshin, R. R. Gazizulin, A. V. Klochkov, V. V. Kuzmin, T. R. Safin, and M. S. Tagirov, *JETP Lett.* **94**, 68 (2011).
21. Yu. M. Bunkov, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safullin, and M. S. Tagirov, *JETP Lett.* **106**, 677 (2017).
22. L. V. Abdurakhimov, M. A. Borich, Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin, D. Konstantinov, M. I. Kurkin, and A. P. Tankeyev, *Phys. Rev. B* **97**, 024425 (2018).
23. Yu. M. Bunkov, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safullin, and M. S. Tagirov, *JETP Lett.* **109**, 40 (2019).
24. Yu. M. Bunkov and D. Konstantinov, *JETP Lett.* **112**, 95 (2020).
25. Ю. М. Буньков, П. М. Ветошко, А. Н. Кузмичев, Г. В. Мамин, С. Б. Орлинский, Т. Р. Сафин, В. И. Белотелов, М. С. Тагиров, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 52 (2020).
26. P. M. Vetoshko, G. A. Knyazev, A. N. Kuzmichev, A. A. Kholin, V. I. Belotelov, and Yu. M. Bunkov, *JETP Lett.* **112**, 299 (2020).
27. D. A. Bozhko, A. A. Serga, P. Clausen, V. I. Vasyuchka, F. Heussner, G. A. Melkov, A. Pomyalov, V. S. L'vov, and B. Hillebrands, *Nature Phys.* **12**, 1057 (2016).
28. O. Dzyapko, I. Lisenkov, P. Nowik-Boltyk, V. E. Demidov, S. O. Demokritov, B. Koene, A. Kirilyuk, T. Rasing, V. Tiberkevich, and A. Slavin, *Phys. Rev. B* **96**, 064438 (2017).
29. D. A. Bozhko, A. A. Serga, A. Pomyalov, V. S. L'vov, and B. Hillebrands, *Nature Comm.* **10**, 2460 (2019).
30. Yu. M. Bunkov and V. L. Safonov, *Journal MMM* **452**, 30 (2018).
31. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 164210 (2010).
32. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, *J. of Low Temp. Phys.* **150**, 135 (2008).
33. R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison Wesley, N.Y. (1965).
34. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, Е. В. Поддьякова, О. Д. Тимофеевская, *ЖЭТФ* **96**, 956 (1989).
35. Yu. Bunkov, *Appl. Mag. Res.* **51** (2020).
36. C. Vittoria, S. D. Yoon, and A. Widom, *Phys. Rev. B* **81**, 1 (2010).
37. A. N. Kuzmichev, P. M. Vetoshko, G. A. Knyazev, V. I. Belotelov, and Yu. M. Bunkov, *JETP Lett.* **112**, 749 (2020).
38. Yu. M. Bunkov, *JETP* **158**, 24 (2020).
39. P. E. Petrov, P. O. Kapralov, G. A. Knyazev, A. N. Kuzmichev, P. M. Vetoshko, Yu. M. Bunkov, and V. I. Belotelov, *Opt. Express* **30**, 1737 (2022).
40. P. E. Petrov, P. O. Kapralov, G. A. Knyazev, A. N. Kuzmichev, P. M. Vetoshko, Yu. M. Bunkov, and V. I. Belotelov, *Opt. Express* **31**, 8335 (2023).
41. G. A. Knyazev, A. N. Kuzmichev, P. E. Petrov, I. V. Savochkin, P. M. Vetoshko, V. I. Belotelov, and Yu. M. Bunkov, *arXiv:2301.10725* (2023).
42. Yu. M. Bunkov, A. N. Kuzmichev, T. R. Safin, P. M. Vetoshko, V. I. Belotelov, and M. S. Tagirov, *Sci. Rep.* **11**, 7673 (2021).
43. O. V. Misochko, M. Hase, K. Ishioka, and M. Kitajima, *Phys. Lett. A* **321**, 5 (2004).
44. D. A. Bozhko, V. I. Vasyuchka, V. Chumak, and A. A. Serga, *Fizika Nizkikh Temperatur* **46**, 462 (2020).

Комментарий к статье “К вопросу об электрической площади электромагнитного импульса” (Письма в ЖЭТФ 118(4), 291 (2023))

Н. Н. Розанов⁺*, М. В. Архипов⁺⁺¹⁾, Р. М. Архипов⁺⁺¹⁾, А. В. Пахомов^{*1)}

⁺ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

^{*} Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 12 сентября 2023 г.

После переработки 20 сентября 2023 г.

Принята к публикации 22 сентября 2023 г.

DOI: 10.31857/S1234567823200120, EDN: pbhvyp

В последнее время большой интерес вызывают вопросы, связанные с получением субциклоновых, в том числе униполярных импульсов, их распространением и усилением в различных средах. При теоретическом анализе часто возникает необходимость использования различных приближений, в том числе традиционно применяемых и кажущихся достаточно обоснованными. В недавней статье [1] содержатся выводы о несохранении электрической площади электромагнитного импульса $\mathbf{S}_E(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt$, где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, t – время и $\mathbf{r}$ – радиус-вектор (в статье [1] эта величина обозначена как $S_T(\mathbf{r})$), при его одномерном распространении. Эти выводы противоречат большому числу работ, в том числе и наших, опубликованных в этом журнале. В связи с этим ниже дается анализ обоснованности и корректности трактовки результатов [1].

Некоторые свойства такой важной величины, как электрическая площадь обсуждались еще более полувека тому назад в [2], где эта величина называлась “интегралом от поля по времени”. Но вывод о ее сохранении при одномерном распространении импульса безотносительно к виду материального уравнения среды был сделан сравнительно недавно в [3]. Условия применимости этого правила сохранения удобно рассмотреть, выведя его непосредственно из уравнения Максвелла [4], как это сделано в [5]. Для этого привлекается уравнение Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1)$$

где $\mathbf{B}$ – магнитная индукция и c – скорость света в вакууме. Считаем, что импульс обладает конечной длительностью, или же допускаем дополнительно наличие в окрестности рассматриваемой точки магнитного поля со значениями индукции, асимптотически совпадающими при $t \rightarrow -\infty$ и $t \rightarrow +\infty$. Тогда, интегрируя (1) по времени в бесконечных пределах, получаем

$$\operatorname{rot} \mathbf{S}_E = 0. \quad (2)$$

Это свойство безвихревого характера векторного поля электрической площади импульсов играет важную роль, например, при анализе возможности оптического эффекта Ааронова–Бома [6]. Для одномерного распространения излучения, когда электрическая площадь импульса зависит только от одной декартовой координаты z , (2) записывается в виде

$$\frac{d}{dz} \mathbf{S}_E = 0. \quad (3)$$

Правило сохранения (3) можно вывести и из волнового уравнения (4) статьи [1], как это сделано в [3]. Для этого следует проинтегрировать это уравнение по времени. Правая часть проинтегрированного уравнения обратится в нуль ввиду того, что в каждой точке поле локализовано по времени и свободный ток со временем убывает. Тогда находим, что $\frac{d^2 \mathbf{S}_E}{dz^2} = 0$. Отсюда $\mathbf{S}_E(z) = C_0 + C_1 z$, где $C_{0,1}$ – постоянные интегрирования. Здесь следует положить $C_1 = 0$ во избежание нефизических, бесконечно больших значений площади. Таким образом мы вновь получаем (3), т.е. правило сохранения электрической площади импульса. В статье [1] при переходе от “точного” волнового уравнения (4), для которого правило сохранения выполняется, к уравнению однонаправленного прибли-

¹⁾ e-mail: nnrosanov@mail.ru; mikhaile.v.arkhipov@gmail.com; arkhipovrostislav@gmail.com; antpakhom@gmail.com

жения (8) это правило может нарушаться именно из-за указанного приближения.

Тем самым, правило сохранения является точным и применимым при указанных выше условиях, которые в статье [1] соблюдаются. Соблюдается это правило и при использовании исходного для [1] волнового уравнения. Вывод статьи [1] о том, что в рамках приближения однонаправленного распространения излучения это правило нарушается, справедлив в том смысле, что именно это приближение приводит к погрешности при описании эволюции электрической площади импульса. Это показывает, что такое приближение, включающее пренебрежение встречной волной, оказывается недостаточно обоснованным и даже неприемлемым для строгого описания распространения импульсов с ненулевой электрической площадью. Подчеркнем, что мы не говорим здесь о введенной авторами [1] другой величине – “пространственной площади импульса”, для которой правило сохранения по времени действительно не соблюдается.

В то же время указанное в [1] мнимое нарушение правила сохранения может быть использовано для оценки характеристик импульса во встречной волне, поскольку, согласно правилу, изменение электрической площади импульса в этой волне должно быть равно (с противоположным знаком) изменению площади импульса в прямой волне.

В заключение заметим, что как выводы работы [1] на основе приближения однонаправленного распространения, так и данного комментария с прямыми следствиями уравнений Максвелла являются теоретическими. Вывод о безвихревом характере векторного поля электрической площади импульса (2) непосредственно из уравнения Максвелла (1) использует чисто локальные свойства поля. При этом под импульсом понимается структура поля с конечными длительностью, энергией и электрической площадью. К настоящему времени имеются экспериментальные свидетельства ненулевых значений электрической площади [7–10] и, по-видимому, единственное ее количественное измерение [11], причем во всех этих экспериментах распространение излучения существенно трехмерное. Что касается правила сохра-

нения электрической площади (3), то его экспериментальная проверка осложняется тем, что оно применимо для одномерного распространения излучения. Последнее может быть реализовано в коаксиальных волноводах или волноводах с неодносвязным поперечным сечением [12]. Проведение таких экспериментов представляется предметом дальнейших исследований.

Анализ выполнения правила сохранения электрической площади импульсов в различных моделях выполнен при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 21-72-10028.

1. А. В. Богатская, А. М. Попов, Письма в ЖЭТФ **118**(4), 291 (2023) [JETP Lett. **118**(4), 296 (2023)].
2. Дж. Джексон, *Классическая электродинамика*, Мир, М. (1965) [J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, J. Wiley, N. Y., London (1962)].
3. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **107**(5), 761 (2009) [Optics and Spectroscopy **107**(5), 721 (2009)].
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982).
5. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические солитоны. От микро- к нано- и атто-*, Физматлит, М. (2011).
6. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **111**(12), 794 (2020) [JETP Lett. **111**(12), 668 (2020)].
7. G. Naumenko and M. Shevelev, J. Instrument. **13**, C05001 (2018).
8. M. C. Hoffmann, S. Schulz, S. Wesch, S. Wunderlich, A. Cavalleri, and B. Schmidt, Opt. Lett. **36**, 4473 (2011).
9. S. Herzer, A. Woldegeorgis, J. Polz, A. Reinhard, M. Almassarani, B. Beleites, F. Ronneberger, R. Grosse, G. G. Paulus, U. Hübner, T. May, and A. Gopal, New J. Phys. **20**, 063019 (2018).
10. D. Gorlova, I. Tsymbalov, R. Volkov, and A. Savel'ev, Laser Phys. Lett. **19**, 075401 (2022).
11. М. В. Архипов, А. Н. Цыпкин, М. О. Жукова, А. О. Исмагилов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **115**(1), 3 (2022) [JETP Lett. **115**(1), 1 (2022)].
12. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **127**, 960 (2019) [Optics and Spectroscopy **127**, 1050 (2019)].

Содержание

Том 118, выпуск 7

Поля, частицы, ядра

Антонов Е.С., Друзкой А.Г., Дубинин М.Н. Возможный метод поиска майорановских нейтрино на будущих лептонных коллайдерах	473
Криворученко М.И., Тырин К.С., Карпешин Ф.Ф. Возбуждение электронной оболочки атома в двойном β -распаде	483
Gabdrakhmanov I.R., Gramotkov N.A., Kotikov A.V., Volkova D.A., Zemlyakov I.A. Bjorken sum rule with analytic coupling at low Q^2 values	491

Оптика, лазерная физика

Савицкий И.В., Воронин А.А., Степанов Е.А., Ланин А.А., Федотов А.Б. Влияние фазы несущей относительно огибающей на генерацию мультиоктавного суперконтинуума и предельно коротких импульсов в полых антирезонансных световодах	493
Пушкарев Д.В., Ризаев Г.Э., Косарева О.Г., Селезнев Л.В. Управление угловой расходимостью терагерцового излучения, генерируемого при одноцветной филаментации, с помощью фазовых оптических элементов	502

Конденсированное состояние

Бобин С.Б., Лончаков А.Т. Гигантский планарный эффект Холла в ультрачистом монокристаллическом образце селенида ртути	506
Попкова А.А., Федянин А.А. Сверточные нейронные сети для предсказания морфологических и нелинейно-оптических свойств тонких пленок квазидвумерных материалов	513
Николаев С.Н., Черноглазов К.Ю., Бугаев А.С., Грановский А.Б., Рыльников В.В. Особенности скейлинга аномального эффекта Холла в нанокompозитных пленках $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ ниже порога перколяции: Проявление со-туннельной холловской проводимости?	519
Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Перваков К.С., Власенко В.А. Сравнение целевой структуры сверхпроводящих пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ недо- и передопированного состава	526
Фраерман А.А. Магнитная спираль в многослойной ферромагнитной наночастице и ее вращение электрическим током	533

Методы теоретической физики

Люблинская А.А., Бурмистров И.С. Диффузионные моды двухзонных фермионов в условиях диссипативной динамики, сохраняющей число частиц	538
---	-----

Мультидисциплинарное

Volovik G.E. Gravity through the prism of condensed matter physics	546
---	-----

Содержание

Том 118, выпуск 8

Поля, частицы, ядра

Амерканов Д.А., Вайшнине Л.А., Гавриков Ю.А., Горшков Б.Л., Денисов А.С., Иванов Е.М., Иванова П.Ю., Иванов Ю.М., Кознов М.А., Мурзин В.И., Щипунов Л.А. Эксперимент по высокоэффективному отклонению протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом на синхротроне ПИЯФ	551
--	-----

Карпешин Ф.Ф. Измерение энергии 8.3-эВ изомера ^{229}Th с помощью фотоэффекта	557
--	-----

Астрофизика и космология

Штерн Б., Ткачев И. GRB 221009A, его предшественник и два послесвечения в данных Ферми	562
--	-----

Оптика, лазерная физика

Баитова В.А., Князева М.А., Муканов И.А., Тарасевич А.О., Наумов А.В., Сон А.Г., Козюхин С.А., Еремчев И.Ю. Эволюция люминесцентных свойств одиночных нанокристаллов перовскита CsPbBr_3 в процессе фотодеградации	570
---	-----

Плазма, гидро- и газодинамика

Мочалов М.А., Илькаев Р.И., Ерунов С.В., Бликов А.О., Огородников В.А., Елфимов С.Е., Аригин В.А., Комраков В.А., Лихутов М.И., Максимкин И.П. Экспериментальное исследование сжимаемости плазмы гелия при давлении до 20 ТПа	578
---	-----

Конденсированное состояние

Новиков И.А., Кирьянов М.А., Фролов А.Ю., Попов В.В., Долгова Т.В., Федянин А.А. Пространственно неоднородное сверхбыстрое размагничивание никелевого магнитолазмонного кристалла	584
---	-----

Дегтяренко П.Н., Садаков А.В., Овчаров А.В., Дегтяренко А.Ю., Гаврилкин С.Ю., Соболевский О.А., Цветков А.Ю., Массалимов Б.И. Влияние концентрации Gd на сверхпроводящие свойства в ВТСП лентах 2-го поколения	590
--	-----

Султанова М.Р., Ремизов И.А., Межов-Деглин Л.П., Левченко А.А. Генерация квантовых вихрей волнами на поверхности сверхтекучего гелия	596
--	-----

Бизяев Д.А., Чукланов А.П., Нургазизов Н.И., Бухараев А.А. Термоиндуцированное переключение намагниченности субмикронных Ni частиц, сформированных на монокристаллическом триборате лития	602
---	-----

Лукьянчук В.Г., Ланкин А.В., Норман Г.Э. Структурные и диффузионные свойства дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития на основе метода молекулярной динамики	609
---	-----

Князев Г.А., Кузмичев А.Н., Петров П.Е., Ветошко П.М., Белотелов В.И., Буньков Ю.М. Взаимодействие магнонных Бозе конденсатов в пленках железо-иттриевого граната через акустическую связь	615
--	-----

Дискуссия

Розанов Н.Н., Архипов М.В., Архипов Р.М., Пахомов А.В. Комментарий к статье “К вопросу об электрической площади электромагнитного импульса” (Письма в ЖЭТФ 118(4), 291 (2023))	620
--	-----

