

Том 119, Выпуск 9–10

ISSN 0370-274X

Май 2024



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ



НАУКА

— 1727 —

2024 г. Том 119 вып. 9, стр. 633–720

2024 г. Том 119 вып. 10, стр. 721–782

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 119

Выпуск 9

10 мая 2024

*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.ru>

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

Торсионно-вращательные переходы в метаноле как зонды фундаментальных физических постоянных – масс электрона и протона

Ю. С. Воротынцева¹⁾, С. А. Левшаков

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 26 марта 2024 г.

После переработки 26 марта 2024 г.

Принята к публикации 1 апреля 2024 г.

В работе рассмотрено использование торсионно-вращательных переходов в молекулах CH_3OH и $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ для оценки возможных вариаций физической постоянной $\mu = m_e/m_p$ – отношение массы электрона к массе протона – по спектральным наблюдениям линий излучения, обнаруженных в микроволновом диапазоне в плотном молекулярном облаке Orion-KL. Получена оценка верхнего предела на относительное изменение μ двумя независимыми способами – по линиям $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и по комбинации линий $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и CH_3OH . Вычисленный верхний предел $\Delta\mu/\mu < 1.1 \times 10^{-8}$ (1σ) соответствует значениям наиболее жестких ограничений на вариабельность фундаментальных физических постоянных, установленных другими астрофизическими методами.

DOI: 10.31857/S1234567824090015, EDN: XVOPVT

Существование во Вселенной темной материи следует из ряда наблюдательных фактов, включающих в себя плоские кривые вращения галактик на больших галактоцентрических расстояниях, гравитационное линзирование космологически удаленных объектов и крупномасштабную структуру пространственного распределения галактик [1]. Для объяснения природы темной материи рассматриваются различные модели, включающие в себя явления, расширяющие Стандартную модель физики элементарных частиц. В некоторых из них предполагается существование гипотетических скалярных полей, взаимодействующих с барионной компонентой обычного вещества [2–4]. Результат таких взаимодействий может приводить к пространственно-временным вариациям безразмерных физических постоянных, таких как постоянная тонкой структуры α и отношение массы электрона к массе протона μ [5–8]. Поскольку уровни энергии в атомах и молекулах зависят от значений α и μ , небольшие изменения их величин приводят к смещению частот соответствующих переходов, и, в частности, к изменению структуры молекулярных спектров [9]. Поэтому новые теории могут быть проверены экспериментально при помощи относительных измерений $\mu = m_e/m_p$. Отметим, что масса электрона m_e напрямую связана с хиггсоподобными скалярными полями, в то время как основ-

ной вклад в массу протона m_p идет непосредственно от энергии связи кварков.

Электронно-колебательно-вращательные переходы в молекулярных спектрах имеют специфическую зависимость от μ , которая индивидуальна для каждого конкретного перехода [10, 11]. Реакция перехода на изменение μ характеризуется безразмерным коэффициентом чувствительности Q_μ , который определяется как

$$Q_\mu = \frac{df/f}{d\mu/\mu}, \quad (1)$$

при этом df/f – сдвиг частоты, а $d\mu/\mu$ определяется выражением

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{\mu_{\text{obs}} - \mu_{\text{lab}}}{\mu_{\text{lab}}}, \quad (2)$$

где μ_{obs} , μ_{lab} – соответствующие астрономические и лабораторные значения μ . При этом, коэффициенты чувствительности могут принимать разные знаки, что приводит к увеличению или уменьшению наблюдаемой частоты, по сравнению с ее лабораторным значением.

Наиболее жесткие пределы на μ -вариации при больших красных смещениях z были получены по внегалактическим наблюдениям квазара J1443+2724 ($z = 4.22$). По анализу линий поглощения лаймановской и вернеровской полос молекулярного водорода H_2 был получен верхний предел $\Delta\mu/\mu < 8 \times 10^{-6}$ [12]. В случае Галактических наблюдений, наиболее жесткие верхние пределы были установлены по наблюдениям инверсионного

¹⁾e-mail: yuvorotynceva@yandex.ru

перехода на 23 ГГц в аммиаке NH_3 , имеющего коэффициент чувствительности $Q_\mu = 4.46$ [13], в сравнении с чисто вращательными переходами в HC_3N , HC_5N и HC_7N , у которых $Q_\mu = 1$: $\Delta\mu/\mu < 7 \times 10^{-9}$ [14]. Независимые оценки по наблюдениям тепловых эмиссионных линий метанола CH_3OH в ядре молекулярного облака L1498 привели к значению $\Delta\mu/\mu < 2 \times 10^{-8}$ [15]. Аналогичные ограничения следуют из измерений радиальных скоростей мазерных линий метанола: $\Delta\mu/\mu < 2 \times 10^{-8}$ [16] и $\Delta\mu/\mu < 2.7 \times 10^{-8}$ [17]. Все оценки верхних пределов приводятся на уровне значимости 1σ .

Следует отметить, что в предыдущих работах изотопологи метанола широко не использовались. Первые оценки верхнего предела на μ -вариации были получены по наблюдениям на 65-метровом радиотелескопе TMRT [18] теплового излучения $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ в области звездообразования NGC 6334I: $\Delta\mu/\mu < 3 \times 10^{-8}$ [19].

В молекулах с заторможенным внутренним движением повышенные коэффициенты чувствительности Q_μ характерны для туннельных переходов, поскольку вероятность туннелирования экспоненциально зависит от массы туннелирующих частиц [13, 20, 21]. Наиболее перспективной молекулой для данных исследований является метанол (CH_3OH), где метильная группа CH_3 может совершать торсионные колебания относительно гидроксильной группы OH . При этом, атом водорода в гидроксильной группе может располагаться в трех возможных позициях с равными энергиями, и, чтобы перейти от одной конфигурации в другую, он должен пройти через потенциальный барьер, создаваемый тремя атомами водорода метильной группы. Таким образом, возникает внутреннее заторможенное движение атома водорода относительно метильной группы.

Коэффициенты чувствительности Q_μ для метанола были впервые рассчитаны двумя независимыми методами в 2011 г. [20, 21]. Полученные результаты показали, что низкочастотные (в диапазоне 1–50 ГГц) переходы имеют высокие значения Q_μ разных знаков: $-17 \leq Q_\mu \leq +43$, что по сравнению с коэффициентами чувствительности линий молекулярного водорода H_2 ($|Q_\mu| \sim 10^{-2}$) составляет выигрыш в предельных оценках $\Delta\mu/\mu$ более чем в 1000 раз.

В нашей предыдущей работе [19] список молекул с высокими коэффициентами чувствительности был расширен за счет изотопологов метанола – $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ со значениями $-32 \leq Q_\mu \leq +78$ и $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ со значениями $-109 \leq Q_\mu \leq +33$.

Переходя к практическим измерениям $\Delta\mu/\mu$, отметим, что для оценки этой величины используются

пары молекулярных линий, имеющих различные коэффициенты $Q_{\mu,1}$ и $Q_{\mu,2}$ [20]:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{V_1 - V_2}{c(Q_{\mu,2} - Q_{\mu,1})}, \quad (3)$$

где V_1 и V_2 – измеренные радиальные скорости этих линий, а c – скорость света. Переход из шкалы частот f в шкалу скоростей V осуществляется радиоастрономическим определением $V/c = (f_{\text{lab}} - f_{\text{obs}})/f_{\text{lab}}$.

Точность измерений $\Delta\mu/\mu$ обуславливается влиянием различных факторов. Неопределенности лабораторных частот и центров линий в астрономических спектрах являются основными источниками ошибок. Кроме этого, существуют систематические ошибки, для оценок которых необходимо использовать различные объекты и переходы в различных молекулах. Изотопологи метанола, переходы в которых имеют высокие коэффициенты чувствительности обоих знаков, являются наиболее подходящими кандидатами для подобных исследований.

Такие измерения удается проводить по спектрам высокого разрешения, которые были получены недавно для молекулярного облака Orion-KL [22]. В опубликованных спектрах присутствуют линии метанола CH_3OH и его двух изотопологов – $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$. Линии $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ обнаруживаются довольно слабыми, и имеют большие ошибки в радиальных скоростях. Однако, спектры излучения $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ показывают линии с более высокими интенсивностями, и их положения определяются достаточно точно (с ошибкой 100 м с^{-1} , что является приемлемым значением для наших целей). Таким образом, становится возможным оценить $\Delta\mu/\mu$ независимо – по линиям $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и в комбинации с переходом $J_{K_u} \rightarrow J_{K_l} = 15_2 - 15_1 E$ в CH_3OH (см. табл. 1 ниже).

Мы отобрали из опубликованных данных пары переходов с приблизительно равными значениями доплеровских ширин Δv_D , таких, чтобы разность коэффициентов чувствительности ΔQ_μ для этих двух переходов была максимальной. Отобранные линии и их параметры перечислены в табл. 1. В первой колонке указан переход, описываемый набором двух квантовых чисел – полного углового момента J и его проекции K на главную ось молекулы – для верхнего (u) и нижнего (l) уровней, во второй колонке – частота перехода, в третьей и четвертой колонках – ширина линии и радиальная скорость соответственно. В пятой колонке указан коэффициент чувствительности Q_μ , взятый из работы [19]. Расчет Q_μ для метанола CH_3OH проводился в данной работе с применением ранее разработанного метода [20]. Как видно из табл. 1, разность коэффициентов чувствительно-

Таблица 1. Отобранные переходы $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и CH_3OH в Orion-KL [22]. В скобках приведены значения ошибок в последних значащих цифрах

Молекула	Переход $J_{K_u} - J_{K_l}$	f_{lab} [МГц]	Δv_{D} [км с $^{-1}$]	V_{LSR} [км с $^{-1}$]	Q_{μ}
$^{13}\text{CH}_3\text{OH}$	$6_2 - 5_3 A^-$	27992.990	2.3(3)	6.9(1)	16.3
$^{13}\text{CH}_3\text{OH}$	$9_2 - 9_1 E$	27581.630	3(1)	6.8(1)	-14.7
CH_3OH	$15_2 - 15_1 E$	28905.812	2.9(1)	6.6(1)	-13.3 ¹⁾

¹⁾ Коэффициент чувствительности рассчитан в данной работе.

сти $\Delta Q_{\mu} \approx 30$, что позволяет произвести уверенную оценку на μ -вариации.

При использовании формулы (3) для переходов в $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ получается значение $\Delta\mu/\mu = (-1.1 \pm \pm 1.5) \times 10^{-8}$, что соответствует верхнему пределу на $\Delta\mu/\mu < 1.5 \times 10^{-8}$ на уровне значимости 1σ . Аналогичный расчет для комбинации линии $6_2 - 5_3 A^-$ молекулы $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и метанольной линии $15_2 - 15_1 E$ дает значение $\Delta\mu/\mu = (-3.4 \pm 1.6) \times 10^{-8}$, и верхний предел $\Delta\mu/\mu < 1.6 \times 10^{-8}$ (1σ). Среднее значение при этом получается равным $\langle \Delta\mu/\mu \rangle = (-2.3 \pm 1.1) \times 10^{-8}$, и соответствующий верхний предел на изменение $\mu - \Delta\mu/\mu < 1.1 \times 10^{-8}$. Этот верхний предел хорошо согласуется с ранее полученными значениями по галактическим наблюдениям CH_3OH [15, 16] и $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ [19].

Результаты данных исследований не указывают на какие-либо значимые систематические ошибки в оценках $\Delta\mu/\mu$. Из этого следует, что предполагаемые влияния хиггсоподобных скалярных полей на массы элементарных частиц не превышают уровень 10^{-8} в диске Галактики. Этот верхний предел, 10^{-8} , совпадает также с ограничением влияния гипотетической пятой силы на адронные взаимодействия [23], поэтому его можно рассматривать как наиболее робастный на текущий момент времени.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета института в рамках темы Государственного задания Физико-технического института им. А.Ф.Иоффе номер FFUG-2024-0002. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. G. Bertone and D. Hooper, Rev. Mod. Phys. **90**, 045002 (2018).
2. R. Onofrio, Phys. Rev. D **82**, 065008 (2010).

3. F. D. Albareti, A. L. Maroto, and F. Prada, Phys. Rev. D **95**, 044030 (2017).
4. S. Alexander, J. D. Barrow, and J. Magueijo, CQG **33**, 14LT01 (2016).
5. J.-P. Uzan, Living Reviews in Relativity **14**, 2 (2011).
6. J. D. Bekenstein, Phys. Rev. D **25** 1527 (1982).
7. P. Brax, Phys. Rev. D **90** 023505 (2014).
8. K. A. Olive and M. Pospelov, Phys. Rev. D **77**, 043524 (2008).
9. R. I. Thompson, Astrophys. Lett. **16**, 3 (1975).
10. D. A. Varshalovich and S. A. Levshakov, JETP Lett. **58**, 237 (1993).
11. M. G. Kozlov and S. A. Levshakov, Ann. Phys. **525**, 452 (2013).
12. J. Bagdonaitė, W. Ubachs, M. T. Murphy, and J. B. Whitmore, Phys. Rev. Lett. **114**, 071301 (2015).
13. V. V. Flambaum and M. G. Kozlov, Phys. Rev. Lett. **98**, 240801 (2007).
14. S. A. Levshakov, C. Henkel, D. Reimers, and P. Moralo, Mem. S. A. It. **85**, 90 (2014).
15. M. Daprà, C. Henkel, S. A. Levshakov, K. M. Menten, S. Muller, H. L. Bethlem, S. Leurini, A. V. Lapinov, and W. Ubachs, MNRAS **472**, 4434 (2017).
16. S. A. Levshakov, I. I. Agafonova, C. Henkel, K. T. Kim, M. G. Kozlov, B. Lankhaar, and W. Yang, MNRAS **511**, 413 (2022).
17. S. Ellingsen, M. Voronkov, and S. Breen, Phys. Rev. Lett. **107**, 270801 (2011).
18. J. H. Wu, X. Chen, Y. K. Zhang, S. P. Ellingsen, A. M. Soblelev, Z. Zhao, S. M. Song, Z. Q. Shen, B. Li, B. Xia, R. B. Zhao, J. Q. Wang, and Y. J. Wu, ApJS **265**, 49 (2023).
19. J. S. Vorotyntseva, M. G. Kozlov, and S. A. Levshakov, MNRAS **527**, 2750 (2024).
20. S. A. Levshakov, M. G. Kozlov, and D. Reimers, ApJ **738**, 26 (2011).
21. P. Jansen, L. H. Xu, I. Kleiner, W. Ubachs, and H. L. Bethlem, Phys. Rev. Lett. **106**, 100801 (2011).
22. X. Liu, T. Liu, Z. Shen et al. (Collaboration), ApJS **106**, 19 (2024).
23. E. J. Salumbides, W. Ubachs, and V. I. Korobov, J. Mol. Spec. **300**, 65 (2014).

Взаимосвязь параметров двулучепреломления и иерархической пространственной структуры микротреков, записанных в объеме плавленого кварца ультракороткими лазерными импульсами

Ю. С. Гулина⁺¹⁾, А. Е. Рупасов⁺, Г. К. Красин⁺, Н. И. Буслеев⁺, И. В. Гриценко⁺, А. В. Богацкая⁺⁺,
С. И. Кудряшов⁺

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

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

Поступила в редакцию 5 марта 2024 г.

После переработки 4 апреля 2024 г.

Принята к публикации 5 апреля 2024 г.

Исследованы изменения фазового набег и длины, а также пространственной структуры двулучепреломляющих микротреков, записанных в объеме плавленого кварца в режиме жесткой фокусировки (числовая апертура $NA = 0.45$ и 0.55) лазерными импульсами с длиной волны 1030 нм, длительностью 0.3 и 0.6 пс, при варьировании энергии импульсов. Показано, что по мере увеличения энергии импульсов величина фазового набег и длины микротреков монотонно растут, а их пространственная структура трансформируется из массива продольных каналов с поперечной субволновой периодичностью Λ_E вдоль вектора поляризации в трехмерную иерархическую структуру с дополнительной периодичностью Λ_k порядка длины волны вдоль оси распространения излучения. Впервые обнаружено, что в трехмерных иерархических структурах имеет место почти двухкратное уменьшение периода Λ_E , что соответствует увеличению наведенной в микротреках разности показателей преломления до $\Delta n \sim 4.5 \times 10^{-3}$.

DOI: 10.31857/S1234567824090027, EDN: RIIZEU

1. Взаимодействие ультракоротких лазерных импульсов с прозрачными твердыми диэлектриками представляет интерес как для фундаментальной физики, так и практических приложений. В результате этого взаимодействия в области лазерного воздействия образуются структурные модификации материала различных типов, например, уплотнение материала (запись волноводов), полости (микрофлюидика), нанометровые и объемные двулучепреломляющие структуры (микротреки), обладающие анизотропным эффектом [1], приводящим к фазовому сдвигу, а также сложным интерференционно-поляризационным взаимодействиям света внутри них [2–5]. Ультракороткие лазерные импульсы с варьируемыми параметрами позволяют создавать на основе двулучепреломляющих микротреков в объеме прозрачных твердых диэлектриков оптические элементы и устройства, такие как “вечная” оптическая память [6–8], поляризационные элементы [9], волновые фазовые пластинки [10], цветные микрофильтры [11], фотонные элементы и устройства [12–15] и т.п.

В двулучепреломляющих микротреках может формироваться как пористая подструктура [16], так и сложная трехмерная периодическая субволновая подструктура, представляющая собой параллельные плоскости с изменяющимся показателем преломления [17]. Так, например, с помощью сканирующей электронной микроскопии, при разрезе диэлектриков, было показано, что внутри двулучепреломляющих микротреков формируется субволновая периодическая подструктура, которая напоминает лазерно-индуцированные периодические поверхностные структуры (ЛИПС) [18, 19]. В работе [20] было продемонстрировано изображение микротрека, в котором наблюдалась продольная и поперечная подструктура с 3 различными пространственными периодами: 1 период в направлении распространения лазерного излучения и 2 периода в направлении поляризации, однако исследование было проведено только для одной энергии и при постоянной частоте следования импульсов. Отмечается, что увеличение числа импульсов приводит к усложнению пространственной структуры микротреков, так, например, в [21] рассмотрен переход от формирования нанополостей к периодической струк-

¹⁾e-mail: gulinays@lebedev.ru

туре, в работе [22] показано постепенное развитие самоорганизующихся структур в направлении вдоль оси распространения лазерного излучения с увеличением величины вносимой ими фазовой задержки, а в работе [23] приводится эволюция пространственных структур перпендикулярно оси микротрека при увеличении плотности энергии и числа импульсов в стекле. Однако, несмотря на обширные исследования в данной области, вопрос прямого сопоставления пространственных параметров и типа подструктуры микротреков с величиной наведенной в них разницы (анизотропии) показателей преломления до сих пор остается открытым.

В настоящей работе проведено исследование взаимосвязи параметров двулучепреломления и иерархической пространственной структуры микротреков, записанных в объеме плавленого кварца под действием жесткофокусированных ультракоротких лазерных импульсов с варьируемыми длительностями и энергиями. На основе измерения фазового сдвига и длины двулучепреломляющих микротреков оценена средняя величина изменения показателя преломления Δn в двулучепреломляющих микротреках. Показано, что в трехмерных иерархических структурах имеет место уменьшение периода вдоль вектора поляризации, что приводит к увеличению анизотропии показателя преломления.

2. В качестве источника излучения при проведении экспериментальных исследований был использован фемтосекундный лазер Satsuma с основной длиной волны 1030 нм (ТЕМ₀₀). Лазерное излучение фокусировалось микрообъективами с различными числовыми апертурами NA = 0.45 (радиус фокального пятна по 1/e²-уровню энергии $w_0 \approx 2$ мкм, длина Рэлея $z_R = n_0 \frac{\pi w_0^2}{\lambda} \approx 12$ мкм, $n_0 = 1.45$ – линейный показатель преломления кварца) и NA = 0.55 (радиус фокального пятна по 1/e²-уровню энергии $w_0 \approx 0.8$ мкм, $z_R \approx 2$ мкм), в объем исследуемого образца из плавленого кварца ($20 \times 10 \times 2$ мм³), закрепленного на трехкоординатной платформе (Priog), на глубину 100 мкм (см. рис. 1). В эксперименте лазерные импульсы следовали с частотой 100 кГц, при этом их длительность составляла 0.3 и 0.6 пс, а энергия варьировалась в диапазоне от 0.13 до 3.3 мкДж. Этот диапазон был выбран для обеспечения пиковых интенсивностей порядка 10–100 ТВт/см², требуемых для формирования периодических структур в плавленом кварце [24].

Для исследования процессов генерации двулучепреломляющих микротреков был проведен ряд экспериментов, в которых за счет перемещения подвижной платформы со скоростью 300 мкм/с были запи-

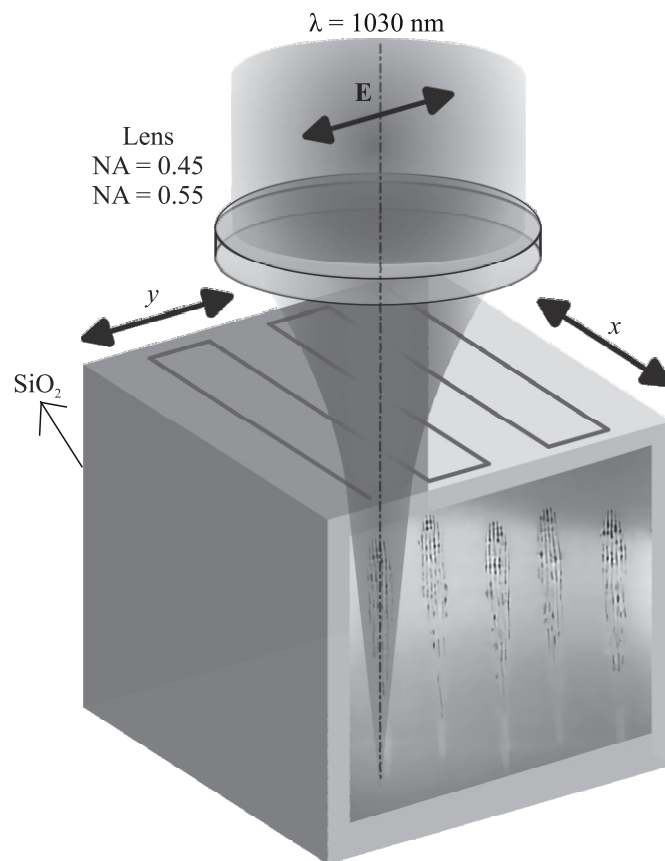


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема записи двулучепреломляющих микротреков

саны области из серий дорожек, соответствующие определенным энергетическим и фокусирующим параметрам. На рисунке 2 приведены изображения записанных областей, полученные с помощью микроскопа Zeiss Axioskop 40 с камерой AxioCam ICs 3. Одна область состоит из 30 линий с шагом 5 мкм с одинаковыми параметрами для изучения регулярности структур. В верхней части рис. 2 приведены изображения областей, записанных микрообъективом с NA = 0.55 в диапазоне энергий импульсов 0.13–0.53 мкДж, что соответствует пиковым интенсивностям лазерного излучения в фокальной области от 12 до 46 ТВт/см², а в нижней – микрообъективом с NA = 0.45 в диапазоне энергий импульсов 0.25–3.3 мкДж (пиковые интенсивности в фокальной области от 12 до 63 ТВт/см²).

Параметры двулучепреломления записанных областей анализировались с помощью поляризметрической системы Thorlabs, работающей на длине волны 633 нм [25]. Измерялось значение фазового сдвига между обыкновенным и необыкновенным лучами на толщине структур (L).

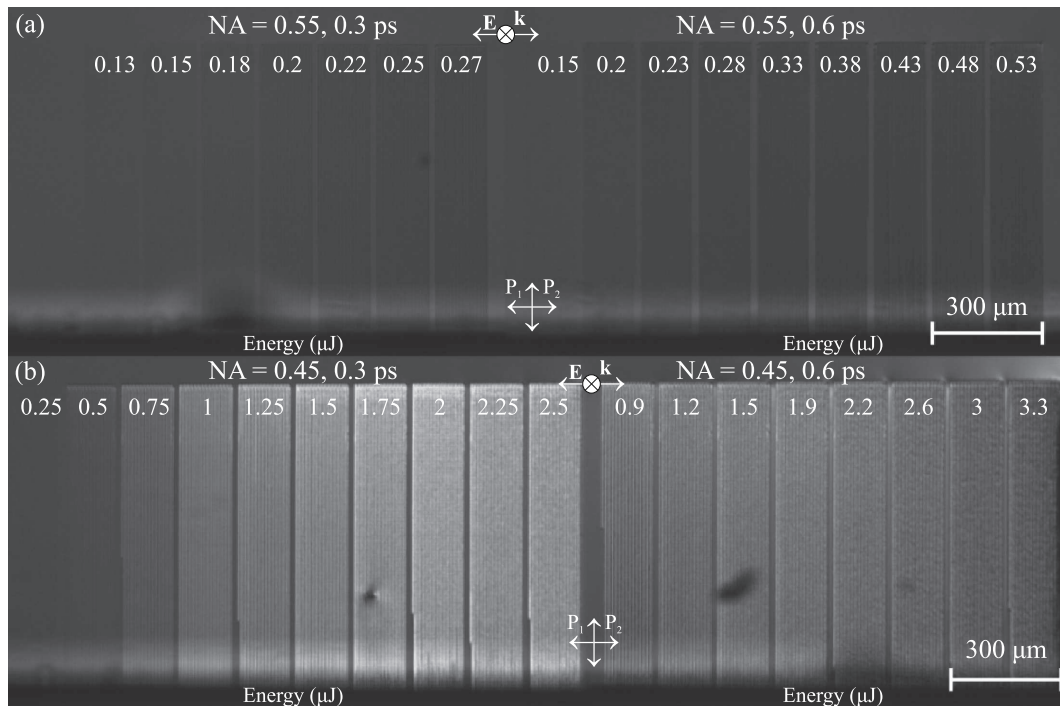


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Изображения серий микрообластей, записанных объективами с числовой апертурой $NA = 0.55$ (а) и $NA = 0.45$ (б)

Для сопоставления характеристик двулучепреломления с образовавшейся подструктурой микротрек были выполнены структурные исследования. Образец, с записанными областями двулучепреломляющих микротрек, был разрезан поперек для визуализации микротрек в сечении. Для резки использовалась алмазная дисковая пила DAD 3220 (DISCO), с последующей полировкой на машине PM5 (Logitech) с абразивами из корунда 3–10 микрон и наночастиц оксида кремния 25 нм. Для визуализации микротрек использовался сканирующий электронный микроскоп Tescan Vega 3.

3. Примеры типовых изображений поперечных сечений серий микротрек, полученных на основе СЭМ-визуализации, представлены на рис. 3. Для наглядности были выбраны серии микротрек, записанных при сопоставимых пиковых интенсивностях в фокальной области порядка 25 ТВт/см^2 . Лазерные импульсы распространялись сверху вниз. Записанные микротреки имеют характерную каплевидную форму и локализованы в предфокальной области микрообъективов. Микротреки, записанные объективом с числовой апертурой 0.45 имеют больший размер и более выраженную сложную периодическую подструктуру, что хорошо коррелирует с размером области взаимодействия лазерного излучения с плавленным кварцем, определяемой в линейном режиме длиной Рэлея [26].

Для обеих числовых апертур при увеличении длительности импульсов наблюдается усложнение пространственной структуры микротрек: для апертуры $NA = 0.45$ появляются упорядоченные периоды вдоль направления распространения (см. вставку на рис. 3), а для $NA = 0.55$ появляется больше периодов перпендикулярно направлению распространения (вдоль вектора поляризации), но при этом упорядочивание вдоль оси в используемом диапазоне энергий импульсов наблюдается слабо. Из чего можно сделать вывод о пороговом характере генерации подструктур, определяемым энергией лазерных импульсов, а не интенсивностью: при сопоставимых опорных интенсивностях в фокальной области наблюдаются различные типы подструктур двулучепреломляющих микротрек.

Для анализа процесса эволюции пространственной структуры микротрек, были выбраны серии, записанные импульсами с длительностью 0.3 пс при фокусировке объективом с $NA = 0.45$, в которых изменение подструктуры при увеличении энергии прослеживается наиболее наглядно (см. рис. 4). Развитие пространственной подструктуры носит пороговый характер и в нем можно выделить 3 характерных порога: первый – при величине энергии в импульсе 0.25 мкДж формируется одиночное протяженное микроповреждение; второй при $E = 0.5 \text{ мкДж}$ соответствует началу образования массива продоль-

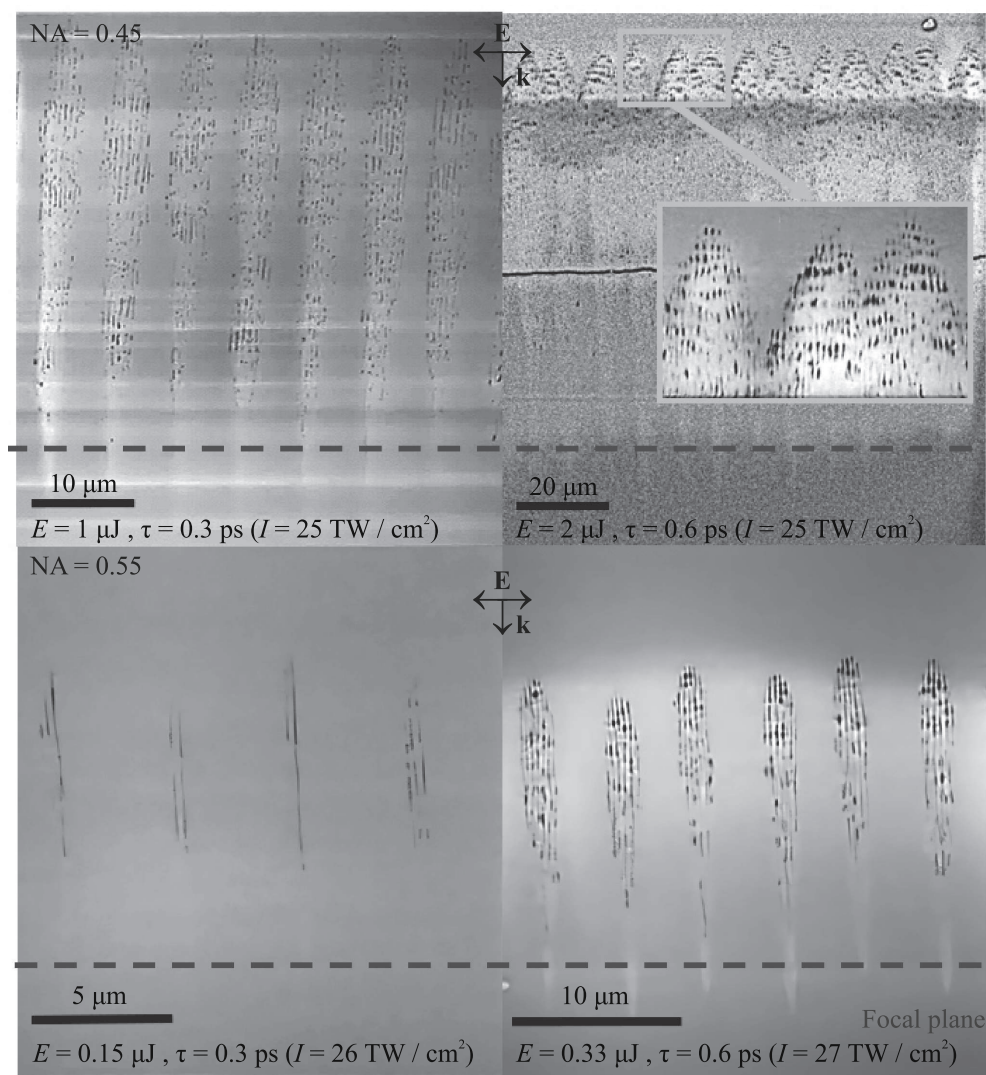


Рис. 3. (Цветной онлайн) СЭМ-визуализация поперечных сечений микротроек, записанных объективами с апертурами $NA = 0.45$ (сверху) и $NA = 0.55$ (снизу)

ных каналов – подструктуры в направлении вектора поляризации с периодом Λ_E ; третий при $E = 1.25 \text{ мкДж}$ – начало развития трехмерной иерархической структуры – подструктуры вдоль направления распространения излучения с периодом Λ_k . Характерный период подструктуры двулучепреломляющего микротрека вдоль распространения лазерного излучения находится в диапазоне $\Lambda_k = 400\text{--}1000 \text{ нм}$ и сопоставим с длиной волны, а вдоль вектора поляризации наблюдается субволновой период $\Lambda_E \leq 400 \text{ нм}$ для массива продольных каналов и $\Lambda_E \approx 200 \text{ нм}$ для иерархической структуры.

Величины фазового сдвига записанных областей, измеренные с помощью поляризметрической системы, представлены на рис. 5. Максимальный фазовый

сдвиг, вносимый двулучепреломляющими микротреками, записанными объективом с числовой апертурой $NA = 0.45$, в зависимости от энергии импульсов в области насыщения составляет $\sim 130^\circ$, а для апертуры $NA = 0.55$ – $\sim 30^\circ$ (ранее нами было показано, что насыщение величины фазового сдвига происходит также с ростом экспозиции [27]). При этом следует отметить довольно хорошую степень однородности величины фазового сдвига в пределах каждой области: порядка 5° для $NA = 0.45$ и порядка 2° для $NA = 0.55$.

Измеренные значения длин L двулучепреломляющих микротроек и наведенной в них разности хода для обыкновенного и необыкновенного лучей Ret , записанных при различных параметрах лазерных им-

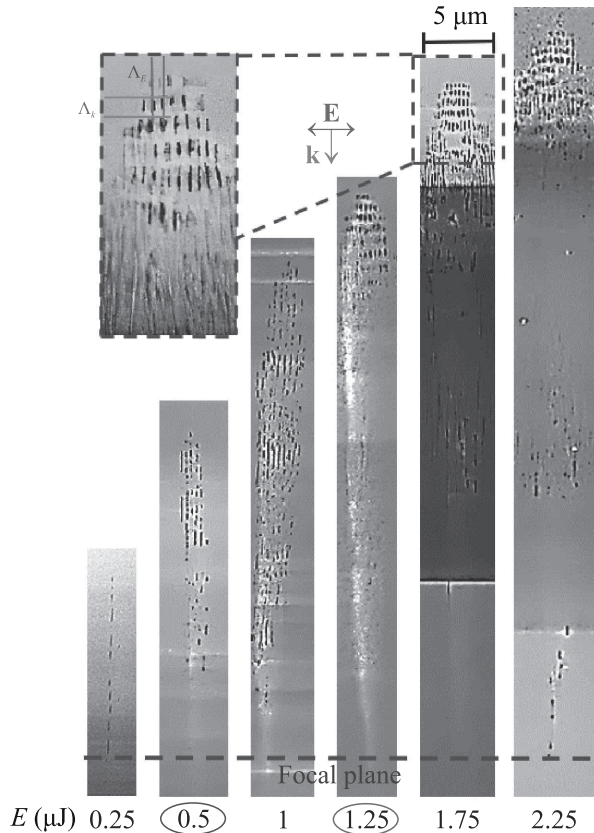


Рис. 4. (Цветной онлайн) СЭМ-визуализация эволюции поперечных сечений микротреков, записанных объективом с апертурой $NA=0.45$ и длительностью 0.3 пс при различных энергиях в импульсе

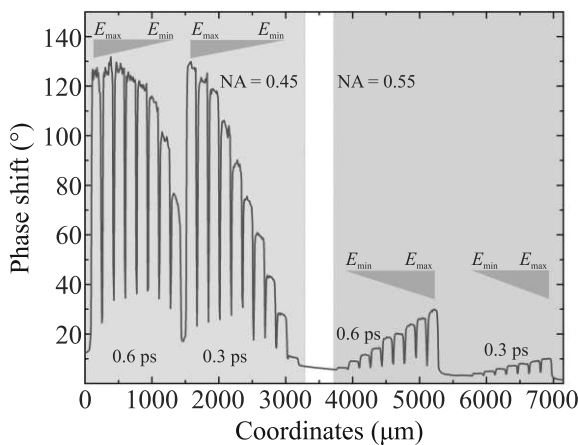


Рис. 5. (Цветной онлайн) Профили записанных областей со значениями фазового сдвига для $NA=0.45$ и $NA=0.55$, и длительностей импульсов $\tau = 0.3$ пс и $\tau = 0.6$ пс

пульсов представлены на рис. 6а, б. Значение разности хода определялось на основе измеренного фазового сдвига по формуле: $Ret = \Delta\phi \cdot \lambda / 2\pi$. Для всего

используемого диапазона параметров записи микро-треков характерно монотонное возрастание значений разности хода по мере увеличения энергии импульсов, за исключением режима с $NA = 0.45$ и $\tau = 0.6$ пс, при котором наблюдается прекращение роста разности хода и его стабилизация в окрестности величины 235 нм. Аналогичное монотонное возрастание при увеличении энергии прослеживается и для длин микротреков, однако наблюдается некоторое насыщение роста длины микротреков, записанных в режиме с $NA=0.45$ и $\tau = 0.6$ пс. Следует отметить, что все зависимости практически ложатся на одну кривую, из чего следует вывод об универсальности наведения фазового сдвига: для произвольной геометрии фокусировки и длительности импульсов можно подобрать такую величину энергии, которая будет обеспечивать требуемый фазовый сдвиг.

Величины наведенной разницы показателей преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей $\Delta n = |n_e - n_o| = Ret/L$, рассчитанные на основе измеренных разностей хода и длин микротреков, в зависимости от энергии лазерных импульсов приведены на рис. 6с. Максимальная величина наведенной анизотропии показателя преломления наблюдается в области энергий свыше 1.25 мкДж, в которой наблюдается возникновение трехмерной иерархической структуры, и достигает величины порядка $\Delta n \sim 4.5 \times 10^{-3}$. При анализе пространственных параметров этой структуры было обнаружено уменьшение периода вдоль вектора поляризации Λ_E от 300 до 200 нм при увеличении энергии импульсов (рис. 6д). При этом следует отметить, что величина аналогичного периода в массиве продольных каналов (0.5 мкДж $< E < 1.25$ мкДж) составляет около 400 нм. Таким образом, можно впервые отметить, что увеличение наведенной анизотропии показателя преломления связано с усложнением пространственной структуры двулучепреломляющих микротреков и уменьшением ее периода.

Говоря об оптических потерях в рассмотренных двулучепреломляющих микротреках, при использованной в настоящей работе жесткой фокусировке последние имеют высокие значения фазового сдвига, но высокие потери из-за рассеяния света (напротив, при высоком пропускании – малые величины фазового сдвига) – см. [28]. Заметим, что в случае слабой фокусировки ситуация аналогична и была исследована нами ранее в работе [27].

4. В заключение, впервые проведено прямое сопоставление параметров двулучепреломления и иерархической пространственной структуры микротреков, записанных в объеме плавленого кварца ультрако-

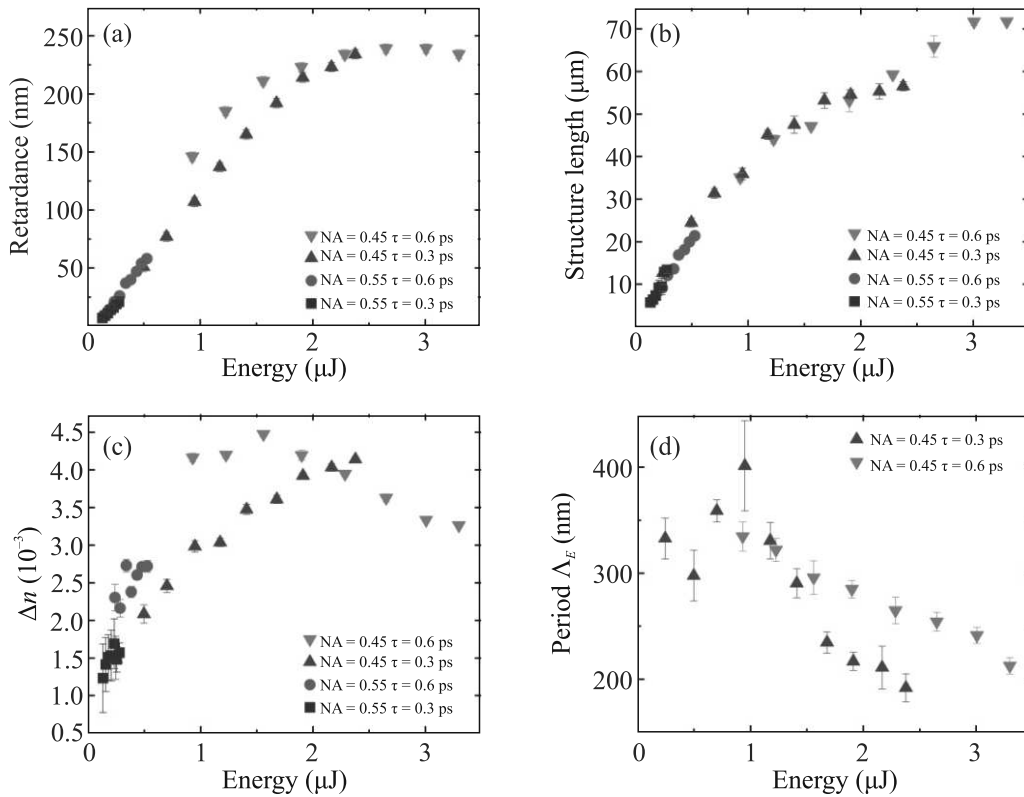


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость величины разности хода (а), длины микротрехов (б), наведенной разницы показателей преломления (с) и периода подструктур вдоль вектора поляризации Λ_E (д) от энергии лазерных импульсов

роткими лазерными импульсами с длиной волны 1030 нм и длительностями 0.3, 0.6 пс, при варьированной энергии импульсов. Показано, что по мере увеличения энергии импульсов структура микротрехов постепенно усложняется – от массива продольных каналов с поперечной субволновой периодичностью Λ_E вдоль вектора поляризации в трехмерную иерархическую структуру с дополнительной периодичностью Λ_k порядка длины волны вдоль оси распространения излучения. Измерения фазового сдвига и длины двулучепреломляющих микротрехов позволили оценить среднюю величину изменения (анизотропии) показателя преломления Δn в двулучепреломляющих микротрехах и впервые обнаружить, что в трехмерных иерархических структурах имеет место кратное уменьшению периода Λ_E , что соответствует кратному увеличению анизотропии показателя преломления до величины порядка $\Delta n \sim 4.5 \times 10^{-3}$.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 22-72-10076).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. S. M. Rytov, Soviet Physics JETP **2**(3), 466 (1956).
2. S. A. Akhmanov, V. I. Emel'yanov, N. I. Koroteev, and V. N. Seminogov, Soviet Phys.-Uspekhi **28**(12), 1084 (1985).
3. A. Rudenko, J. P. Colombier, S. Höhm, A. Rosenfeld, J. Krüger, J. Bonse, T. E. Itina, Sci. Rep. **7**(1), 12306 (2017).
4. J. L. Deziel, L. J. Dube, S. H. Messaddeq, Y. Messaddeq, and C. Varin, Phys. Rev. B **97**(20), 205116 (2018).
5. Y. Shimotsuma, K. Hirao, J. Qiu, and P. G. Kazansky, Mod. Phys. Lett. B **19**(5), 225 (2005).
6. H. Wang, Y. Lei, L. Wang, M. Sakakura, Y. Yu, G. Shayeganrad, and P. G. Kazansky, Laser Photonics Rev. **16**(4), 2100563 (2022).
7. Z. Wang, B. Zhang, Z. Wang, J. Zhang, P. G. Kazansky, D. Tan, and J. Qiu, Adv. Mater. **35**(47), 2303256 (2023).
8. J. Gao, X. Zhao, Z. Yan, Y. Fu, J. Qiu, L. Wang, and J. Zhang, Adv. Funct. Mater. **34**(11), 2306870 (2024).
9. Y. Shimotsuma, M. Sakakura, P. G. Kazansky, M. Beresna, J. Qiu, K. Miura, and K. Hirao, Adv. Mater. **22**(36), 4039 (2010).
10. M. Beresna, M. Gecevicius, P. G. Kazansky, and T. Gertus, Appl. Phys. Lett. **98**(20), 201101 (2011).
11. S. I. Kudryashov, P. A. Danilov, A. E. Rupasov, M. P. Smayev, N. A. Smirnov, V. V. Kesaev,

- A. N. Putilin, M. S. Kovalev, R. A. Zakoldaev, and S. A. Gonchukov, *Laser Physics Lett.* **19**(6), 065602 (2022).
12. J. D. Mills, P. G. Kazansky, E. Bricchi, and J. J. Baumberg, *Appl. Phys. Lett.* **81**(2), 196 (2002).
13. F. Flamini, L. Magrini, A. S. Rab, N. Spagnolo, V. D'Ambrosio, P. Mataloni, F. Sciarrino, T. Zandrini, A. Crespi, R. Ramponi, and R. Osellame, *Light Sci. Appl.* **4**(11), 354 (2015).
14. R. Osellame, H. Hoekstra, G. Cerullo, and M. Pollnau, *Laser Photonics Rev.* **5**(3), 442 (2011).
15. R. Stoian, C. D'amico, Y. Bellouard, and G. Cheng, *Ultrafast Laser Volume Nanostructuring of Transparent Materials: From Nanophotonics to Nanomechanics*, in R. Stoian and J. Bonse (editors), *Ultrafast Laser Nanostructuring Springer Series, in Optical Sciences*, Springer International Publishing, Cham (2023), v. 239.
16. G. Shayeganrad, X. Chang, H. Wang, C. Deng, Y. Lei, and P. G. Kazansky, *Opt. Express* **30**(22), 41002 (2022).
17. E. Bricchi, B. G. Klappauf, and P. G. Kazansky, *Opt. Lett.* **29**(1), 119 (2004).
18. Y. Shimotsuma, P. G. Kazansky, J. Qiu, and K. Hirao, *Phys. Rev. Lett.* **91**(24), 247405 (2003).
19. A. Borowiec and H. K. Haugen, *Appl. Phys. Lett.* **82**(25), 4462 (2003).
20. P. G. Kazansky, E. Bricchi, Y. Shimotsuma, J. Qiu, and K. Hirao, *3D periodic nano-structures in glass irradiated by ultrashort light pulses*, in *Conference on Lasers and Electro-Optics*, IEEE, Baltimore, MD, USA (2005), p. CFG5.
21. Y. Dai, A. Patel, J. Song, M. Beresna, and P. G. Kazansky, *Opt. Express* **24**(17), 19344 (2016).
22. Y. Shimotsuma, T. Asai, K. Miura, K. Hirao, and P. G. Kazansky, *Journal of Laser Micro/Nanoengineering* **7**(3), 339 (2012).
23. E. Casamenti, S. Pollonghini, and Y. Bellouard, *Opt. Express* **29**(22), 35054 (2021).
24. A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, A. M. Popov, *Subwavelength Plasma Gratings Formation in the Process of Laser Modification in the Volume of Fused Silica*, in *Proceedings of the 12th International Conference on Photonics, Optics and Laser Technology*, Rome, Italy (SciTePress, Setúbal, 2024), v. 1, p. 15.
25. S. B. Mehta, M. Shribak, and R. Oldenbourg, *J. Opt.* **15**(9), 094007 (2013).
26. S. Kudryashov, A. Rupasov, R. Zakoldaev, M. Smaev, A. Kuchmizhak, A. Zolot'ko, M. Kosobokov, A. Akhmatkhanov, and V. Shur, *Nanomaterials* **12**(20), 3613 (2022).
27. N. I. Busleev, A. E. Rupasov, V. V. Kesaev, N. A. Smirnov, S. I. Kudryashov, and R. A. Zakoldaev, *Opt. Spectrosc.* **131**(2), 161 (2023).
28. А. Е. Рупасов, И. В. Гриценко, Н. И. Буслеев, Г. К. Красин, Ю. С. Гулина, А. В. Богацкая, С. И. Кудряшов, *Оптика и спектроскопия* **132**(1), 83 (2024).

Сличение двух оптических часов на атомах тулия с использованием синхронного опроса¹⁾

А. Головизин^{+,*2)}, Д. Мишин⁺, Д. Проворченко⁺, Д. Трегубов⁺, Н. Колачевский^{+,*}

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

^{*} Международный центр квантовых технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 марта 2024 г.

После переработки 5 апреля 2024 г.

Принята к публикации 5 апреля 2024 г.

Экспериментально выполнено сличение двух оптических часов на основе атомов тулия в оптических решетках на интервале времени до одного часа. Использование синхронного метода опроса часового перехода в двух независимых атомных ансамблях с помощью одного ультрастабильного лазера позволило устранить флуктуации частоты лазера из измеряемой разности частот и достичь относительной погрешности измерений 10^{-16} после 500 с усреднения, что соответствует относительной нестабильности $2 \times 10^{-15} / \sqrt{7}$. Успешная демонстрация долговременной работы двух систем с использованием синхронного опроса часовых переходов открывает возможность выполнять исследование систематических сдвигов в оптических часах на атомах тулия на уровне 17 знака точности.

DOI: 10.31857/S1234567824090039, EDN: PJTMIV

Введение. Сегодня в оптических часах продемонстрированы рекордно низкие значения систематической погрешности частоты на уровне 18 знака после запятой [1–3]. В свою очередь, экспериментально показана возможность измерения разности частот переходов в атомах с относительной погрешностью 10^{-18} – 10^{-21} что, например, открывает возможность исследования гравитационного красного смещения на миллиметровом масштабе [4–6]. Успехи в создании оптических часов привели к пониманию необходимости переопределения единицы времени (секунды) в международной системе единиц СИ, которое намечено на 2030 г. [7]. Для реализации единицы времени на основе оптических часов требуются точные сличения времени и частоты между различными метрологическими институтами с погрешностью измерений на уровне 10^{-18} . Это может быть реализовано как с помощью сети стабилизированных оптических волокон [8, 9], так и с использованием транспортируемых оптических стандартов частоты [10–13] с соответствующими характеристиками. Транспортируемые оптические часы востребованы для межконтинентального сличения стандартов, для релятивистской геодезии [14], а также для вывода в космос для обеспечения синхронизации (навигация, передача данных).

Оптические часы на атомах тулия являются перспективными для создания транспортируемых систем вследствие малой чувствительности частоты часового перехода на длине волны 1140 нм к внешним ролям. Так, ранее нашей группой был продемонстрирован рекордно низкий для нейтральных атомов сдвиг частоты тепловым излучением [15], а также низкая чувствительность к магнитному полю при формировании синтетической частоты [16]. Также преимуществом тулиевых оптических часов являются удобные длины волн лазерных систем, необходимых для лазерного охлаждения, удержания и спектроскопии часового перехода [15, 17].

В данной работе приведены первые экспериментальные результаты по синхронному сличению двух оптических часов на атомах тулия. В текущей схеме эксперимента реализована техника синхронного опроса, т.е. одновременного возбуждения часовых переходов в двух системах (оптических часах) с помощью одного ультрастабильного часового лазера. Это позволяет исключить влияние фазовых шумов излучения лазера, в том числе за счет периодического опроса часового перехода (эффект Дика), из измеряемой разности частот и достичь нестабильности, которая ограничена стандартным квантовым пределом для независимых частиц [6, 4].

Экспериментальная установка и протокол измерений. Схема уровней атома тулия, задействованных в эксперименте, приведена на рис. 1а. Прин-

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: artem.golovizin@gmail.com

ципы работы первичной и вторичной магнито-оптических ловушек, оптической накачки, одновременного возбуждения двух часовых переходов 4-3 и 3-2 (рис. 1а), а также измерение эффективности возбуждения часового перехода, подробно описаны в работах [16–21]. Все лазерные системы, в том числе ультрастабильный часовой лазер, являются общими, в то время как конструкции двух вакуумных систем (“основной” [16] и “компактной” [22]), в которых захватываются ультрахолодные атомы тулия, несколько отличаются. Отметим, что компактная установка (создана в 2021 г.) имеет размер менее $80 \times 50 \times 60 \text{ см}^3$, и в ней реализована упрощенная схема замедления атомов и внутривакуумный резонатор для оптической решетки. Установка собрана на одной оптической плите, при этом все необходимое оптическое излучение подводится с использованием оптических одномодовых волокон. В будущем это позволит поднять систему на высоту порядка 1 м для исследования гравитационного сдвига частоты.

Как было показано в предыдущих работах [16, 23], при формировании синтетической частоты

$$\nu_s = \frac{\nu_{32} + \nu_{43}}{2}, \quad (1)$$

полностью исключается влияние магнитного поля за счет равенства по модулю зеемановского сдвига нижних и верхних сверхтонких подуровней. В свою очередь, дифференциальная частота

$$\nu_d = \nu_{32} - \nu_{43} \quad (2)$$

лежит в радиочастотном диапазоне и отражает как влияние флуктуаций внешнего магнитного поля, так и шумы, вносимые атомным ансамблем (например, проекционный шум), и системой считывания (шумы фотодетекторов, электроники).

Единичный цикл измерения имеет длительность $T_c = 1 \text{ с}$ и состоит из этапов, схематично показанных на рис. 1b и подробно описанных в [21, 24] и в дополнительных материалах. Такой элементарный цикл повторяется в течение всего сеанса измерений (рис. 1d). Синхронизация двух систем осуществляется в момент окончания зеемановского охлаждения (показано пунктирной линией на рис. 1b) в каждом цикле, что обеспечивает одновременность начала и окончания пробных часовых импульсов с точностью порядка 1 мкс. Для измерения отстройки частоты излучения часового лазера от атомных переходов и стабилизации частоты излучения к каждому переходу в обеих системах проводится возбуждение часового перехода при внесении отстройки пробного излучения $\pm \Delta\nu_c/2 = \pm 5 \text{ Гц}$ от текущего значения резонансной частоты (поочередно на правом

или левом склоне контура линии, см. рис. 1е), $\Delta\nu_c = 10 \text{ Гц}$ – ширина контура линии при 80-мс длительности пробного часового импульса. Отстройка частоты лазерного излучения от резонанса определяется $\delta^{\text{err}} = -\Delta\nu_c(\eta^+ - \eta^-)$, где $\eta^+(\eta^-)$ – измеренные эффективности возбуждения на правом (левом) склоне. Вносимая коррекция частоты $\Delta\nu^{\text{corr}}$ соответствующего акустооптического модулятора, которая компенсирует смещение частоты часового лазера от атомного перехода, вычисляется с использованием цифрового пропорционально-интегрального контроллера с типичными коэффициентами $P = 0.15$ и $I = 0.1$ [23]. Периодически (один раз в n циклов “основных” измерений) выполняются калибровочные измерения, в частности, для определения угла между вектором поляризации решетки и задающим магнитным полем [16].

Таким образом, в каждой системе (основной и компактной) для каждого часового перехода формируется массив

$$\nu^{\text{corr}}[n] = \sum_{i=0}^n \Delta\nu^{\text{corr}}[i], \quad (3)$$

который является аккумулятивной коррекцией частоты соответствующего АОМа после n циклов измерений, а массив

$$\Delta\nu^{\text{meas}}[n] = \nu^0 + \nu^{\text{corr}}[n] + \delta^{\text{err}}[n] \quad (4)$$

отражает мгновенную отстройку частоты часового излучения от частоты атомного перехода, так как ошибка $\delta^{\text{err}}[n]$ измеряется при скорректированной на $\nu^{\text{corr}}[n]$ частоте соответствующего АОМа, ν^0 – начальное смещение частоты излучения соответствующим АОМом.

Для каждой оптической системы из этих величин можно построить массив коррекций и измеренных значений отстройки синтетической и дифференциальной частот:

$$\begin{aligned} \nu_s^{\text{corr}} &= \frac{\nu_{32}^{\text{corr}} + \nu_{43}^{\text{corr}}}{2}, \quad \nu_d^{\text{corr}} = \nu_{32}^{\text{corr}} - \nu_{43}^{\text{corr}}; \\ \Delta\nu_s^{\text{meas}} &= \frac{\Delta\nu_{32}^{\text{meas}} + \Delta\nu_{43}^{\text{meas}}}{2}, \\ \Delta\nu_d^{\text{meas}} &= \Delta\nu_{32}^{\text{meas}} - \Delta\nu_{43}^{\text{meas}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, $\Delta\nu_d^{\text{meas}}$ отражает измеренную дифференциальную частоту ν_d в отдельной системе тулиевых оптических часов (все радиочастоты определены по сравнению с активным водородным мазером). Разность частот между двумя системами равна $\Delta\nu_x^{\text{meas},m} - \Delta\nu_x^{\text{meas},c}$, где индекс x может соответствовать переходу 4-3, 3-2 или синтетической частоте s .

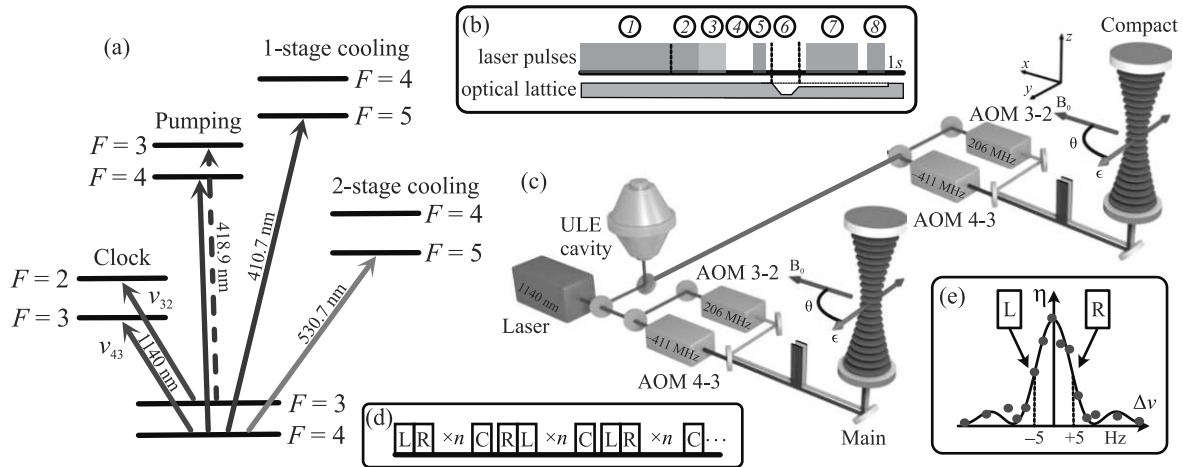


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента. (a) – Схема энергетических уровней атома тулия. В эксперименте выполняется стабилизация частоты пробного часового излучения к переходам 4-3 (частота ν_{43}) и 3-2 (ν_{32}). (b) – Единичный цикл измерения: 1 – зеemanовское замедление; 2 – охлаждение в первичной МОЛ; 3 – охлаждение во вторичной МОЛ; 4 – включение магнитного поля и разлет незахваченных в оптическую решетку атомов; 5 – оптическая накачка; 6 – просеивание “горячих” атомов; 7 – возбуждение часовых переходов; 8 – считывание населенностей часовых уровней. (c) – Принципиальная схема экспериментальной установки для формирования часовых импульсов и опроса атомов, удерживаемых в оптической решетке, в основной и компактной системах. AOM – акустооптический модулятор, ULE cavity – ультрастабильный опорный резонатор. (d) – Последовательность циклов измерений на левом (L) и правом (R) склонах и калибровочные измерения (C). Пара измерений на левом и правом склоне повторяется n раз, после чего происходит калибровочное измерение. (e) – Экспериментально измеренный контур линии возбуждения часового перехода 1440 нм (красные кружки) и теоретическая аппроксимация функцией sinc (сплошная линия) с указанием точек опроса на левом и правом склонах

Ниже, обсуждая нестабильность разности часовых частот в двух оптических часах, мы будем говорить именно о этой величине.

Результаты. На рисунке 2 и 3 представлены результаты сличения двух систем при одновременном опросе. Глубина решетки в основной системе составляет $300 E_r$ ($E_r = 1$ кГц – энергия отдачи фотона решетки) при задающем магнитном поле 500 мГс; в компактной системе эти параметры были 500 E_r и 340 мГс, соответственно. Общая длительность эксперимента составила 1 ч. На рисунке 2а представлена долговременная динамика числа атомов до начала опроса на каждом из часовых переходов в основной и компактной системах в процессе эксперимента. Для основной системы происходило уменьшение числа атомов в первые 2800 с, после чего произошло кратковременное падение до нуля и восстановление до начального значения. Такое поведение связано с температурным дрейфом усиливающего резонатора оптической решетки и работой системы обратной связи, приведшей к перепривязке. Планируется усовершенствование усиливающего резонатора для устранения этого эффекта.

В связи с особенностью оптической накачки, число атомов в начальном состоянии $|g, F=4, m_F=0\rangle$ примерно на 25 % больше, чем в состоянии $|g, F=3, m_F=0\rangle$. В обеих системах кратковременные флуктуации числа атомов находятся на уровне 5–8 % (1 стандартное отклонение). Так как в каждом цикле измеряется число возбуждившихся и невозбудившихся атомов и независимо вычисляются эффективности возбуждения для каждого часового перехода, разность начальных населенностей и колебание числа атомов не оказывают существенного влияния на привязку частоты лазерного излучения к каждому из часовых переходов 4-3 и 3-2.

На верхнем графике на рис. 2b представлена зависимость измеренного отклонения $\Delta\nu_s^{\text{meas}}$ (зеленая полупрозрачная линия, за вычетом начального смещения частоты) и внесенной коррекции ν_s^{corr} (черная линия) для синтетической часовой частоты в основной системе. Мгновенные флуктуации частоты часового лазера, которые могут достигать 2 Гц, не превышают полуширины линии перехода $\Delta\nu_c/2 = 5$ Гц, чем обеспечивается корректное определение мгновенной ошибки частоты. На нижнем графике на

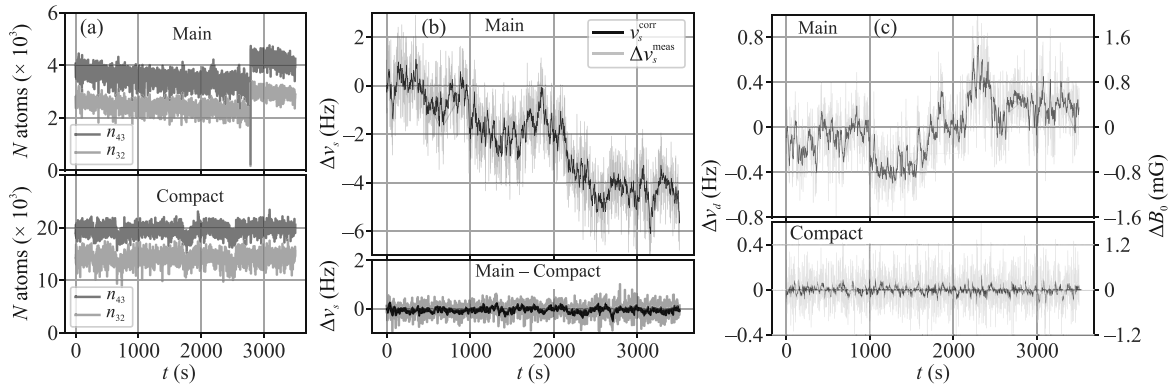


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Число атомов в основной (верхний график) и компактной (нижний график) системах. Синим цветом отображается начальное число атомов на $|g, F = 4, m_F = 0\rangle$ (часовой переход 4-3), оранжевым – на $|g, F = 4, m_F = 0\rangle$ (часовой переход 3-2). (б) – Верхний график – измеренная отстройка частоты лазерного излучения от синтетической часовой частоты в основной системе $\Delta \nu_s^{\text{meas}}$ (полупрозрачная зеленая линия) и усредненное значение ν_s^{corr} (черная линия), которое соответствует внесенной коррекции частоты (см. уравнение (5)). Нижний график – измеренная (серый) и усредненная (черный) разность синтетических часовых частот между компактной и основной системами. (с) – Графики изменения дифференциальной частоты в основной (верхний) и компактной (нижний) системах. Полупрозрачные линии соответствуют $\Delta \nu_d^{\text{meas}}$, сплошные линии – ν_d^{corr} . На правой оси представлено соответствующее изменение величины задающего магнитного поля

рис. 2b приведена разность измеренных значений (серая линия, за вычетом начального смещения частоты) и внесенных корректировок (черная линия) синтетических частот в двух системах. Флуктуации мгновенной разности синтетических часовых частот в двух системах значительно меньше, чем флуктуации смещения отдельных синтетических частот вследствие того, что опрос часовых переходов в двух системах осуществляется синхронно, что делает флуктуации частоты часового лазера общими для двух систем.

О стабильности величины задающего магнитного поля B_0 можно судить по дифференциальной частоте $\nu_d = \nu_{32} - \nu_{43}$, которая обладает квадратичным зеемановским коэффициентом $\beta_d \approx 514 \text{ Гц/Гс}^2$. На рисунке 2с представлены графики изменения дифференциальных часовых частот в основной (верхний график) и компактной (нижний график) системах, полупрозрачные линии отображают $\Delta \nu_d^{\text{meas}}$, сплошные линии ν_d^{corr} (см. (5)). Используя формулу квадратичного зеемановского сдвига, можно пересчитать частотные флуктуации в флуктуации магнитного поля $\Delta B_0 = \Delta \nu_d / (2\beta_d B_0)$ (правая шкала). Отличие результатов для двух систем связано с усовершенствованной конструкцией компактной системы. Флуктуации лабораторного магнитного поля в направлении, перпендикулярном оси квантования, влияют на сдвиг от оптической решетки вследствие ненулевой дифференциальной тензорной поляризуемости часовых переходов [16]. Однако, даже для ам-

плитуды флуктуаций, наблюдаемых в основной системе, соответствующий сдвиг частоты будет менее 1 мГц, что значительно меньше текущей погрешности измерений.

Девииции Аллана для разности синтетических часовых частот ν_s^{meas} между стационарной и компактной системами, а также разности частот отдельных переходов 4-3 (ν_{43}) и 3-2 (ν_{32}) для двух систем представлены на рис. 3. Видно, что после $\tau \approx 100$ с нестабильность частот отдельных переходов ν_{43} и ν_{32} начинает расти, что в основном связано с флуктуациями величины магнитного поля в основной системе. В то же время девиация Аллана для синтетической частоты ν_s^{meas} , нечувствительной к магнитному полю, продолжает уменьшаться и достигает 1×10^{-16} спустя 500 с измерений. Сплошная черная линия отражает девиацию, описываемую формулой $\sigma_y = 2 \times 10^{-15} / \sqrt{\tau}$, где τ – время измерения в секундах, что является аппроксимацией для ν_s^{meas} на больших временах усреднения и соответствует результатам, полученным в других лабораториях мира.

На рисунке 3 также приведены девиации Аллана дифференциальных частот $\Delta \nu_d^{\text{meas}}$ в двух системах, нормированных на оптическую частоту перехода. Как отмечалось выше, флуктуации $\Delta \nu_d^{\text{meas}}$ связаны с шумами магнитного поля, проекционными шумами и шумами считывания. В случае компактной системы девиация $\Delta \nu_d^{\text{meas}}$ составляет менее 2×10^{-17} после 200 с усреднения (фиолетовые точки). Результат является весьма обнадеживающим, поскольку

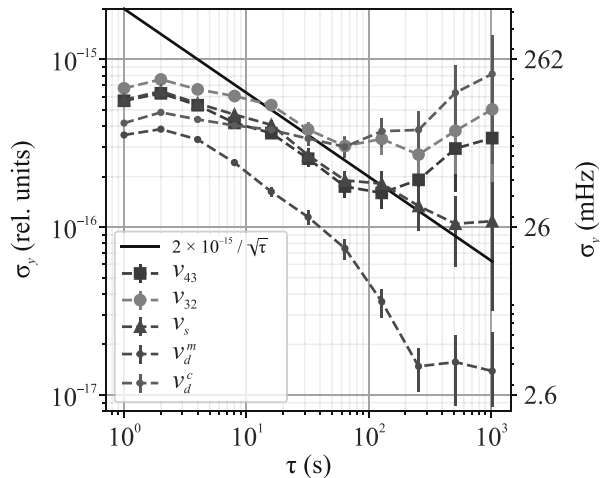


Рис. 3. (Цветной онлайн) Девиация Аллана разности частот двух оптических часов на атомах тулия при синхронном опросе. Оранжевые кружки – девиация разности измеренных отстроек частоты $\Delta\nu_{43}^{\text{meas}}$ часового перехода 4-3 в основной и компактной системах; синие квадраты – то же для частоты $\Delta\nu_{32}^{\text{meas}}$ перехода 3-2; красные треугольники – для синтетической частоты $\Delta\nu_s^{\text{meas}}$. Рост девиации Аллана для частот ν_{43} и ν_{32} на временах более 100 с в основном связан с флуктуациями магнитного поля в основной системе. Зеленые (фиолетовые) точки демонстрируют девиацию Аллана дифференциальной частоты $\Delta\nu_d^{\text{meas}}$ относительно активного водородного лазера ($\nu_d \approx 617$ МГц), нормированную на оптическую частоту часового перехода, в основной (компактной) системе

подтверждает, что значительная часть источников шумов наших компактных оптических часов дает вклад ниже 2×10^{-17} и позволяет рассчитывать на соответствующую погрешность сличения в будущем. С другой стороны, в основной системе (зеленые точки) этот вклад оказывается более, чем на порядок больше $(3-8) \times 10^{-16}$, что, как отмечалось, связано с большими флуктуациями магнитного поля и меньшим количеством атомов.

В свою очередь, наблюдаемая нестабильности разности синтетических частот двух систем ν_s^{meas} (красные треугольники) также находится на уровне 1×10^{-16} , что может быть объяснено вкладом некоррелированных шумов между двумя системами. К ним могут относиться проекционные шумы опрашиваемого ансамбля атомов в основной системе и флуктуации частоты, вносимые оптоволоконными, по которым излучение часового лазера доставляется до каждой из систем. Последние можно устранить методом активной компенсации [25], что планируется сделать в ближайшей перспективе.

Заключение. В работе показаны результаты первого долговременного сличения двух тулиевых

оптических часов с длительностью измерений один час. Относительная нестабильность частот двух систем достигла 1×10^{-16} после 500 с измерения, что сопоставимо с рядом зарубежных образцов. Отметим, что это значение является предельным для микроволновых стандартов (активные водородные мазеры, рубидиевые и цезиевые фонтаны), однако для его достижения требуются интервалы усреднения более суток. Для устранения влияния шумов часового лазера и эффекта Дика использовался метод синхронного опроса, при котором возбуждение часовых переходов в обеих системах выполнялось одновременно. Это позволило уменьшить нестабильность измеряемой частоты на 1 с с $\sigma_L = 0.56$ Гц, наблюдаемой в отдельной системе, до нестабильности $\sigma_s = 0.15$ Гц для разности двух синтетических частот. Отметим, что последнее значение оказывается ниже нестабильности частоты часового лазера $\sigma_L \approx 0.26$ Гц на 1 с [26]. Если сравнивать с измерениями в одной системе с поочередной установкой исследуемого параметра для характеристики его влияния на частоту (например, магнитного поля) [16], выигрыш в нестабильности частоты составил более 6 раз. Мы также продемонстрировали отсутствие влияния флуктуаций магнитного поля, которые в основной системе имели величину порядка 1 мГц, на синтетическую часовую частоту.

В свою очередь, исследуя дифференциальную частоту между двумя компонентами часового перехода, нам удалось охарактеризовать вклад собственных шумов одной из систем (компактной) менее 2×10^{-17} , что указывает на возможность достижения этого уровня при сличении двух систем после внесения ряда технических усовершенствований.

Стоит отметить, что достигнутой точности измерения разницы синтетических часовых частот 10^{-16} уже достаточно для наблюдения гравитационного смещения при изменении относительной высоты атомных ансамблей на 1 м. Увеличение надежности работы отдельных лазерных систем, усиливающего резонатора в основной установке и компенсация шумов оптических волокон позволит в ближайшее время провести более длительные измерения с меньшей нестабильностью сличения частот.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) в рамках гранта #21-72-10108.

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует.

1. S. M. Brewer, J.-S. Chen, A. M. Hankin, E. R. Clements, C.-w. Chou, D. J. Wineland, D. B. Hume, and

- D.R. Leibrandt, *Phys. Rev. Lett.* **123**(3), 033201 (2019).
2. T. Bothwell, D. Kedar, E. Oelker, J.M. Robinson, S.L. Bromley, W.L. Tew, J. Ye, and C.J. Kennedy, *Metrologia* **56**(6), 065004 (2019).
3. B. Bloom, T. Nicholson, J. Williams, S. Campbell, M. Bishof, X. Zhang, W. Zhang, S. Bromley, and J. Ye, *Nature* **506**(7486), 71 (2014).
4. T. Bothwell, C.J. Kennedy, A. Aepli, D. Kedar, J.M. Robinson, E. Oelker, A. Staron, and J. Ye, *Nature* **602**(7897), 420 (2022).
5. W. McGrew, X. Zhang, R. Fasano, S. Schäffer, K. Beloy, D. Nicolodi, R. Brown, N. Hinkley, G. Milani, M. Schioppo, T. Yoon, and A. Ludlow, *Nature* **564**(7734), 87 (2018).
6. E. Oelker, R. Hutson, C. Kennedy et al. (Collaboration), *Nat. Photonics* **13**(10), 714 (2019).
7. N. Dimarcq, M. Gertsz, G. Milet et al. (Collaboration), *Metrologia* **61**, 012001 (2023).
8. F. Riehle, *Nat. Photonics* **11**(1), 25 (2017).
9. K. Predehl, G. Grosche, S. Raupach, S. Droste, O. Terra, J. Alnis, T. Legero, T. Hänsch, T. Udem, R. Holzwarth, and H. Schnatz, *Science* **336**(6080), 441 (2012).
10. S. Koller, J. Grotti, St. Vogt, A. Al-Masoudi, S. Dörscher, S. Häfner, U. Sterr, and C. Lisdat, *Phys. Rev. Lett.* **118**(7), 073601 (2017).
11. I. Semerikov, K.Y. Khabarova, I. Zalivako, A. Borisenko, and N. Kolachevsky, *Bull. Lebedev Phys. Inst.* **45**, 337 (2018).
12. J. Stuhler, M.A. Hafiz, B. Arar et al. (Collaboration), *Measurement: Sensors* **18**, 100264 (2021).
13. J. Cao, J. Yuan, S. Wang et al. (Collaboration), *Appl. Phys. Lett.* **120**(5), 054003 (2022).
14. M. Takamoto, Y. Tanaka, and H. Katori, *Appl. Phys. Lett.* **120**(14), 140502 (2022).
15. A. Golovizin, E. Fedorova, D. Tregubov, D. Sukachev, K. Khabarova, V. Sorokin, and N. Kolachevsky, *Nat. Commun.* **10**(1), 1724 (2019).
16. A.A. Golovizin, D.O. Tregubov, E.S. Fedorova, D.A. Mishin, D.I. Provorchenko, K.Y. Khabarova, V.N. Sorokin, and N.N. Kolachevsky, *Nat. Commun.* **12**(1), 5171 (2021).
17. A. Golovizin, D. Tregubov, M. Yaushev, D. Mishin, D. Provorchenko, and N. Kolachevsky, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **306**, 108629 (2023).
18. D. Sukachev, A. Sokolov, K. Chebakov, A. Akimov, S. Kanorsky, N. Kolachevsky, and V. Sorokin, *Phys. Rev. A* **82**(1), 011405 (2010).
19. D. Sukachev, A. Sokolov, K. Chebakov, A. Akimov, N. Kolachevsky, and V. Sorokin, *JETP Lett.* **92**, 703 (2010).
20. G. Vishnyakova, E. Kalganova, D. Sukachev, S. Fedorov, A. Sokolov, A. Akimov, N. Kolachevsky, and V. Sorokin, *Laser Phys.* **24**(7), 074018 (2014).
21. E. Fedorova, A. Golovizin, D. Tregubov, D. Mishin, D. Provorchenko, V. Sorokin, K. Khabarova, and N. Kolachevsky, *Phys. Rev. A* **102**(6), 063114 (2020).
22. A. Golovizin, D. Tregubov, D. Mishin, D. Provorchenko, and N. Kolachevsky, *Opt. Express* **29**(22), 36734 (2021).
23. D. Tregubov, D. Provorchenko, D. Mishin, N. Kolachevskii, and A. Golovizin, *JETP* **137**(2), 195 (2023).
24. D.A. Mishin, D.I. Provorchenko, D.O. Tregubov, A.A. Golovizin, K.Y. Khabarova, V.N. Sorokin, and N.N. Kolachevsky, *Quantum Electron.* **52**(6), 505 (2022).
25. K.Y. Khabarova, K.S. Kudayarov, G.A. Vishnyakova, and N.N. Kolachevsky, *Quantum Electron.* **47**(9), 794 (2017).
26. K.S. Kudayarov, A.A. Golovizin, A.S. Borisenko, N.O. Zhadnov, I.V. Zalivako, D.S. Kryuchkov, E. Chiglintsev, G.A. Vishnyakova, K.Y. Khabarova, and N.N. Kolachevsky, *JETP Lett.* **114**, 243 (2021).

Времяразрешающее детектирование терагерцового отклика фотодинамически сформированных плазмонных метаповерхностей

И. А. Новиков¹, М. А. Кирьянов¹, В. И. Стадничук, Т. В. Долгова¹, А. А. Федянин¹)

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

Поступила в редакцию 27 марта 2024 г.

После переработки 5 апреля 2024 г.

Принята к публикации 7 апреля 2024 г.

Предложена модификация метода терагерцовой спектроскопии с временным разрешением, состоящая в прямом измерении временной зависимости поля прошедшего терагерцового импульса, выделении из нее части, соответствующей множественным отражениям от поверхностей объекта, и последующему ее анализу без применения Фурье-преобразования. Апробация метода проводится на примере решеток, фотодинамически сформированных на поверхности арсенида галлия и поддерживающих возбуждение коллективных плазмонных мод в терагерцовом диапазоне. Предлагаемый подход позволяет обойти ограничения, характерные для терагерцовой спектроскопии с временным разрешением, дополняя и расширяя возможности уже существующего аппарата терагерцовой фотоники.

DOI: 10.31857/S1234567824090040, EDN: KVOKQK

Одним из основных методов исследования в терагерцовой (ТГц) фотонике является методика ТГц спектроскопии во временной области (Terahertz time-domain spectroscopy, THz-TDS) [1]. Эта методика подходит для решения широкого класса задач [2], к которым относятся, например, исследование колебательных переходов в молекулах [3], спектроскопия фазовых переходов [4, 5] и элементарных возбуждений [6–8] в твердых телах, характеристика материалов [9, 10]. Последняя задача состоит в определении дисперсии материальных констант (показателей преломления и поглощения, проводимости и др.) в ТГц диапазоне на основе спектров пропускания или отражения. Методика THz-TDS позволила охарактеризовать большое количество различных материалов, включая полупроводники [11], сверхпроводники [12], ферроэлектрики [13], топологические изоляторы [14], полимеры [15], жидкости [10] и растворы [16], биологические ткани [17]. Столь широкий набор объектов исследования и научных задач способствовал развитию и расширению методики: был разработан метод исследования сильно поглощающих материалов [18], предложены техники и подходы, позволяющие существенно повысить чувствительность детектирования [19, 20], сформирован аппарат нелинейной ТГц спектроскопии [21]. Несмотря на это, методика THz-TDS обладает рядом особенностей, влияющих на точность получаемых результатов и ограничивающих ее применение в некоторых задачах.

В силу того, что эта методика использует преобразование Фурье, получаемый на выходе спектр измеренного сигнала зависит от параметров измерения (длительность, шаг и др.) [22]. Кроме того, множественные отражения от поверхностей и границ раздела образца или подложки могут приводить к появлению дополнительных особенностей в его временном отклике и осцилляциям в спектре [23]. Осцилляции становятся существенными при небольшой амплитуде даже одного переотражения. В методике THz-TDS множественные отражения являются паразитным фактором, с которым необходимо бороться [24] или учитывать при постобработке [25, 26]. Поиск геометрий, позволяющих этого избежать, может быть технически сложной задачей [27].

Одним из актуальных направлений ТГц фотоники является поиск методов управления ТГц излучением. Перестройка его длины волны, частоты, фазы, изменение поляризации и направления распространения – лишь часть задач, которые требуют решения. Гибкость в реализации подобных преобразований могут предоставить метаматериалы и метаповерхности – искусственно созданные трехмерные и двумерные структуры, состоящие из упорядоченных субволновых элементов [28]. Упорядочивание приводит к появлению свойств, не характерных как для данного материала в целом, так и для отдельного составляющего элемента [29, 30]. Более того, такая структура поддерживает возбуждение резонансных электромагнитных мод различных типов

¹)e-mail: fedyanin@nanolab.phys.msu.ru

[31–35], позволяющих “захватить” падающее излучение и локализовать его на поверхности, тем самым значительно повысив эффективность реализуемого преобразования. К таким резонансным электромагнитным возбуждениям относятся, в частности, различные плазмонные моды [36–39]. Концепция плазмонных метаматериалов и метаповерхностей получила широкое распространение в оптическом диапазоне [40] и сейчас развивается в терагерцевом [41, 42].

ТГц метаматериалы и метаповерхности, как правило, являются пассивными: их свойства фиксируются в момент изготовления и меняются внешними воздействиями лишь в небольших пределах, что существенно ограничивает их возможности. В связи с этим ведутся исследования, направленные на создание активных ТГц метаматериалов [43]. В работе [27] был предложен метод, позволяющий формировать на поверхности полупроводника пространственное распределение заряда произвольной геометрии на субмиллиметровых масштабах фемтосекундным лазерным импульсом за счет фотоэффекта. Распределение заряда полностью повторяет пространственный профиль оптической засветки, полученный с помощью масок [44], пространственного модулятора света (ПМС) [27, 45] или проекторов [46, 47]. Этот метод, получивший название фотодинамического формирования или фотоиндуцирования, позволил создать различные динамические фотонные элементы для ТГц диапазона: перестраиваемые фильтры [48], дефлекторы [46], поляризаторы [47], волноводы [49], интегрированные в системы визуализации модуляторы ТГц излучения [45, 50, 51], дифракционные решетки [52] и ТГц метаповерхности более сложной геометрии [53]. Возбуждение плазмонных мод в фотодинамически сформированных ТГц структурах было показано для хаотически расположенных частиц (субмиллиметровых антенн) [54], но не для метаповерхностей.

В данной работе предлагается модификация методики ТГц спектроскопии с временным разрешением. Идея состоит в прямом измерении временной зависимости электрического поля прошедшего через образец ТГц излучения, выделению из нее двух частей, соответствующих напрямую прошедшему через образец и двукратно отраженному от его поверхностей импульсам – и последующем их анализе без применения преобразования Фурье. Предложенный метод используется для исследования одномерных решеток, сформированных посредством структурированной засветки лазерным импульсом поверхности арсенида галлия и поддерживающих возбуждение поверхностных плазмонов в ТГц диапазоне.

В работе исследовалась пластинка высокоомного арсенида галлия (GaAs) толщиной 400 мкм, на поверхности которой фемтосекундным импульсом с длиной волны 800 нм формировались изображения одномерных решеток. Их период (сотни мкм) попадал в спектральный диапазон генерирующегося в системе ТГц излучения. На ЖК-дисплей отражающего фазового ПМС Holoeye Pluto-2.1 подавалась программно сгенерированная голограмма, изображение которой впоследствии восстанавливалась оптическим пучком на поверхности образца. Голограмма генерировалась с помощью двумерного обратного преобразования Фурье исходного изображения. Всего использовалось два типа изображений: сплошной прямоугольник, занимающий всю рабочую область ПМС, и одномерные решетки с различным периодом и ориентацией полос. Первый тип использовался для серии калибровочных измерений, второй – для основного эксперимента.

В качестве источника для генерации ТГц излучения и фотоиндуцирования решеток использовался титан-сапфировый фемтосекундный лазер с регенеративным усилителем с центральной длиной волны 800 нм, длительностью импульсов 50 фс, частота следования которых составляла 1 кГц, а энергия – 3 мДж. Путем двух последовательных разделений на оптических светоделителях исходный пучок был преобразован в три импульса – генерирующий, детектирующий и фотоиндуцирующий – в соотношении 63:3:33 по интенсивности, соответственно. Первый использовался для генерации ТГц излучения в спектральном диапазоне от 0.25 до 2 ТГц методом нелинейно-оптического выпрямления в кристалле теллурида цинка (ZnTe) толщиной 0.5 мм. Сгенерированное ТГц излучение впоследствии фокусировалось на поверхность образца при помощи двух параболических зеркал. Прошедший ТГц импульс регистрировался электрооптическим методом при помощи детектирующего пучка в стандартной схеме THz-TDS [2]. Фотоиндуцирующий пучок использовался для восстановления на поверхности образца сформированной на дисплее модулятора голограммы. В засвеченных областях происходила генерация свободных носителей. Образец был выставлен по нормали к фотоиндуцирующему пучку. ТГц импульс падал на образец под углом 30° и был поляризован в плоскости падения (вставка на рис. 1а).

На рисунке 1а показан временной профиль электрического поля ТГц импульса, прошедшего через образец в отсутствие засветки. Сигнал имеет сложную форму, в нем наблюдается большое количество осцилляций и четыре выраженных пика на задерж-

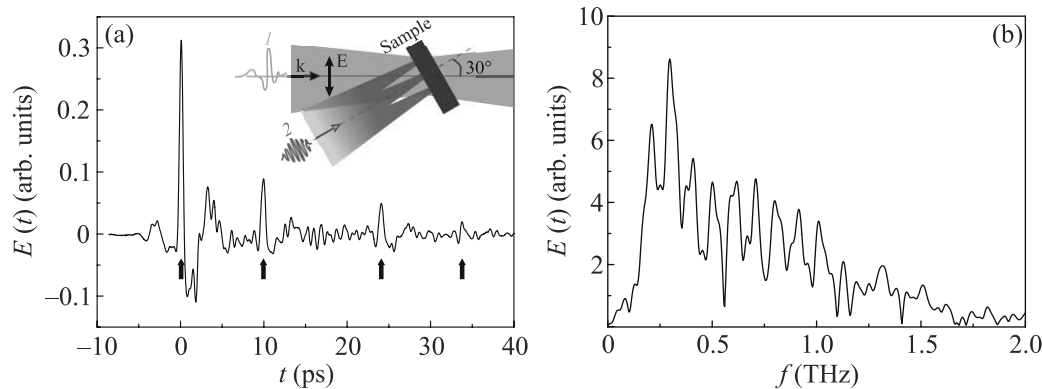


Рис. 1. (Цветной онлайн) Поле (а) и спектр (б) ТГц импульса, прошедшего через незасвеченную пластинку GaAs. На этом и последующих рисунках начало временной шкалы совмещено с положением максимума основного (первого) импульса. Вставка: ход лучей на образец. Цифрами обозначены ТГц (1) и фотоиндуцирующий (2) импульсы. $\mathbf{k}$ и $\mathbf{E}$ – направление распространения и поляризация ТГц пучка, соответственно

ках 0, 9.8, 24 и 33.7 пс. Форма сигнала в окрестности каждого из пиков совпадает с точностью до постоянного множителя. Это позволяет сделать предположение о том, что в регистрируемом сигнале наблюдаются, как минимум, четыре отдельных ТГц импульса, три из которых являются копиями первого. Копии появляются вследствие множественных отражений от поверхностей (граней) образца и кристалла-генератора, являющихся плоскопараллельными пластинками. Так, пик на задержке 9.8 пс соответствует импульсу, прошедшему кристалл ZnTe напрямую и испытавшему двукратное отражение от передней и задней граней образца. Пики на задержках 24 и 33.7 пс соответствуют импульсам, испытавшим отражение от поверхностей кристалла-генератора. Первый из них проходит образец без отражений, второй – дважды отражается от его поверхностей. Импульсы, испытывающие большее число отражений, обладают меньшей амплитудой и неразличимы на фоне шумов и осцилляций.

На рисунке 1b показан спектр ТГц импульса, прошедшего через незасвеченный образец. В нем наблюдаются осцилляции сложной формы, появившиеся из-за наличия в исходном временном сигнале смещенных друг относительно друга копий основного импульса. Согласно свойству запаздывания преобразования Фурье, Фурье-образ от смещенного сигнала равен Фурье-образу такого же, но несмещенного сигнала с точностью до осциллирующего множителя $e^{-i\omega\Delta\tau}$, где $\Delta\tau$ – временная задержка между ними. Использование спектра, представленного на рис. 1b, для определения показателей преломления n и поглощения α материала в ТГц диапазоне приведет к трудно интерпретируемым результатам, требующим объемной постобработки.

Показатели n и α образца могут быть найдены напрямую из анализа положения и амплитуды второго импульса. Будем в дальнейшем называть этот импульс сателлитом. Соответствующий ему пик отстоит от пика основного импульса на $\Delta t = 9.8$ пс. С учетом толщины исследуемого образца (400 мкм), угла падения ТГц импульса (30°) и геометрии системы, нетрудно найти значение n незасвеченного GaAs, составляющее 3.64, что близко к данным из литературы [11]. Показатель α может быть найден из сравнения амплитуд основного импульса и сателлита. Уменьшение амплитуды последнего вызвано, во-первых, потерей энергии при отражении от поверхностей образца, а, во-вторых, поглощением в его объеме. Тогда, отношение амплитуд обоих импульсов (пиков) может быть найдено по следующей формуле:

$$\frac{E_m}{E_{\text{sat}}} = \frac{1}{r^2 e^{-2\alpha d}}, \quad (1)$$

где r – коэффициент отражения от границы воздух-образец, α – показатель поглощения образца, d – его толщина. Определив из временной зависимости (рис. 1a) значение E_m/E_{sat} , с учетом найденного ранее n и толщины d можно найти α . В нашем случае отношение E_m/E_{sat} равно $0.31/0.085 \approx 3.64$. Рассчитанное по формулам Френеля значение коэффициента r для найденного ранее n составляет 0.525. Отношение $1/r^2$ будет равно 3.63, что близко к значению E_m/E_{sat} . Следовательно, $e^{-2\alpha d} \rightarrow 1$, т.е. поглощение незасвеченного низколегированного GaAs мало, что также согласуется с литературными данными. Отметим, что значения n и α были определены без использования Фурье-преобразования и результатов референсного измерения без образца.

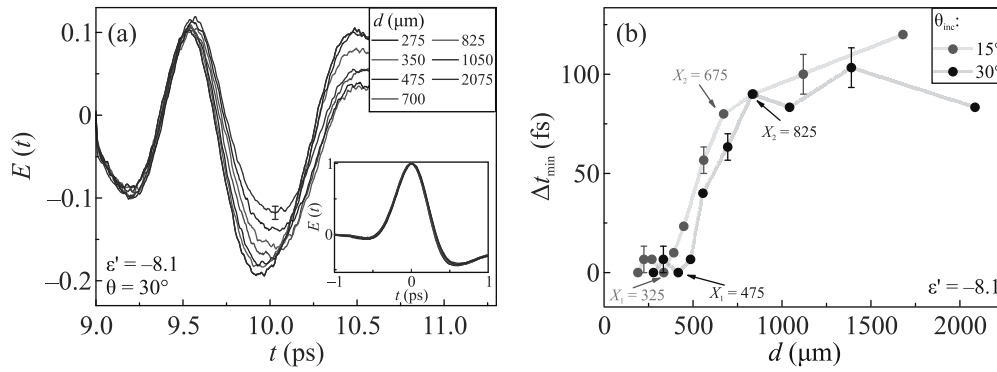


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость электрического поля импульса-спутника от времени $E(t)$ для разных значений периода d формируемых на поверхности GaAs решеток. Кривые нормированы на максимум основного импульса. Вставка: нормированное поле основного импульса. (б) – Смещение минимума поля спутника $\Delta t_{\min}$ при изменении периода d решеток для двух углов падения ТГц излучения. Плотность энергии фотоиндуцирующего пучка – 30 мкДж/см². Полосы решеток ориентированы перпендикулярно поляризации ТГц излучения

Применим предложенный метод для исследования отклика фотодинамически сформированных на поверхности арсенида галлия решеток, поддерживающих в ТГц диапазоне возбуждение поверхностных плазмонов. Эксперимент проводится следующим образом: на поверхности пластинки из арсенида галлия формируется изображение одномерных решеток с различным периодом. Ориентация их полос и мощность формирующего оптического импульса выбираются такими, чтобы выполнялось условие на возбуждение поверхностных плазмонов. Так, используется ортогональная к плоскости падения и поляризации ТГц излучения ориентация полос. Плотность энергии импульса накачки берется равной 30 мкДж/см². Калибровочные измерения с однородной засветкой показывают, что при такой плотности энергии концентрация возбужденных носителей N_{pc} составляет 5×10^{17} см⁻³ согласно оценке на основе метода, предложенного в работе [55]. В одномерной прямоугольной решетке со скважностью 1/2 значение N_{pc} будет в 2 раза больше, т. е. 1×10^{18} см⁻³. Расчет в рамках модели Друде показывает, что в области локализации поверхностных плазмонов значение действительной части диэлектрической проницаемости ϵ'_{eff} при такой концентрации составит -8.1 . Этого достаточно для выполнения условия на возбуждение плазмонов на границе с воздухом ($\epsilon'_{\text{eff}} < -\epsilon_d$, где $\epsilon_d = 1$). Период формируемых на поверхности арсенида галлия прямоугольных решеток варьируется в диапазоне от 280 мкм до 2100 мкм. Выбор указанного диапазона обусловлен тем, что частота дифракционных аномалий (0.25–2.1 ТГц) при используемом угле падения (30°) будет попадать в спектральный диапазон генерируемого в схеме ТГц излучения (0.25–2 ТГц).

Как и в случае с незасвеченным арсенидом галлия, измеряется временная зависимость поля ТГц импульса, прошедшего через образец, из которой выделяется и анализируется часть, соответствующая полю импульса-спутника. На рисунке 2а представлены временные зависимости поля $E(t)$ импульса-спутника для разных значений периода d формируемых на поверхности арсенида галлия одномерных решеток. Временной профиль полученных сигналов имеет сложную форму, обусловленную интерференцией нескольких волн. К ним относятся волны, отражающиеся от границы раздела арсенида галлия с воздухом, а также взаимодействующие с градиентной средой, сформированной оптической накачкой в толще полупроводника. В результате такой интерференции пик импульса-спутника во временном сигнале в окрестности задержки 10 пс переходит в провал. Дальнейшая интерпретация профиля данного импульса выходит за рамки целей данной статьи. Можно видеть (см. рис. 2а), что увеличение периода формируемых решеток приводит к уменьшению амплитуды провала и его смещению в сторону больших временных задержек. Зависимость смещения минимума поля импульса-спутника $\Delta t_{\min}$ от периода d формируемых решеток для данного угла падения ТГц импульса (30°) показана черной кривой на рис. 2б. За весь диапазон изменения периода решеток (275–2075 мкм) минимум смещается примерно на 100 фс. Смещение происходит немонотонно: вплоть до периода 475 мкм положение минимума поля спутника $t_{\min}$ практически не меняется, после чего начинает быстро возрастать. Быстрый рост завершается по достижению периода 825 мкм. При дальнейшем увеличении d $t_{\min}$ практически не меняется.

Период формируемых на поверхности образца решеток, прежде всего, влияет на частоты дифракционных (например, аномалии Рэлея) и плазмонных (условие фазового синхронизма) аномалий. Амплитуды интерферирующих волн, формирующих временной профиль импульса-спутника, от периодов решеток зависят слабо, а определяются их скважностью и мощностью фотоиндуцирующего пучка, которые зафиксированы в данном эксперименте. Это позволяет выдвинуть гипотезу о дифракционной природе наблюдаемого эффекта. Провести ее проверку можно, повторив то же измерение зависимости смещения положения минимума $\Delta t_{\min}$ от периода d формируемых решеток для другого угла падения θ_{inc} ТГц импульса на образец при условии постоянства остальных параметров (ϵ' , скважности, ориентации полос). Такая зависимость для углов падения в 15° и 30° представлена на рис. 2b. Можно видеть, что изменение угла падения привело к смещению зависимости. Период, начиная с которого наблюдалась модификация провала во временной зависимости поля импульса-спутника (рис. 2a) и появление перегиба в зависимости $\Delta t_{\min}$ от d (рис. 2b), уменьшился с 475 до 325 мкм.

Интерпретировать полученные кривые можно следующим образом. Профиль импульса-спутника меняется при перекрытии его спектра с зависящей от d аномалией Рэлея. Точки перегиба в зависимости $\Delta t_{\min}$ от d (рис. 2b) соответствуют периодам решетки, при которых частота аномалии Рэлея попадает на границы спектра спутника. Так, первая точка перегиба (высокочастотная граница) для угла падения 15° наблюдается на периоде 325 мкм, для 30° – на 475 мкм. Значение частоты аномалии Рэлея f_R для +1 порядка дифракции можно найти по формуле:

$$f_R = \frac{c}{d(1 - \sin \theta_{\text{inc}})}. \quad (2)$$

Так как спектр импульса-спутника определяется источником ТГц излучения и не меняется от эксперимента к эксперименту, расчет f_R для этих значений периодов должен приводить к одинаковым результатам. Для случая $d = 325$ мкм и $\theta_{\text{inc}} = 15^\circ$ найденное по формуле (2) значение f_R составляет 1.25 ТГц, для случая $d = 475$ мкм и $\theta_{\text{inc}} = 30^\circ$ – 1.26 ТГц. Совпадение полученных значений подтверждает дифракционную природу наблюдаемой модификации провала в профиле импульса-спутника. Вторая точка перегиба в зависимости на рис. 2b, соответствующая низкочастотной границе его спектра, наблюдается на периодах 675 и 825 мкм для углов падения в 15° и 30° , соответственно. Можно заметить (отчетливо видно

для случая 15°), что на периодах, лежащих за этой границей, где отсутствует перекрытие спектра спутника и аномалии Рэлея, провал продолжает смещаться. Это может быть вызвано влиянием поверхностных плазмонов, спектральная ширина резонанса которых существенно больше, чем у аномалии Рэлея.

Для того, чтобы разграничить дифракционный и плазмонный механизмы, следует использовать геометрии, не поддерживающие возбуждение поверхностных плазмонов. Так, например, плазмоны не будут возбуждаться в решетках, ориентация полос которых параллельна плоскости падения и поляризации падающего излучения. На рисунке 3 показаны зависимости смещения минимума импульса-спутника $\Delta t_{\min}$ от периода d формируемых решеток с поперечной (плазмонной) и продольной (не плазмонной) ориентацией полос, соответственно. В обоих

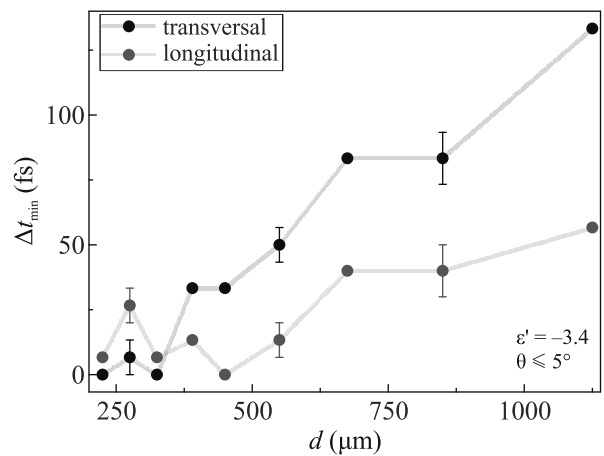


Рис. 3. (Цветной онлайн) Смещение с периодом d решетки положения минимума поля спутника $\Delta t_{\min}$ для двух ориентаций полос решетки – поперечной (плазмонной) и продольной (не плазмонной). Образец выставлен практически по нормали к падающему ТГц импульсу

экспериментах используется одинаковая плотность энергии фотоиндуцирующего пучка 23 мкДж/см^2 , ТГц импульс направляется на образец практически по нормали ($\theta_{\text{inc}} \leq 5^\circ$). Видно, что размах кривой для решетки с поперечной ориентацией полос составляет 133 фс, что практически в 2.7 раза больше, чем для решетки с продольными полосами (50 фс). Напомним, профиль импульса-спутника меняется тогда, когда смещающиеся с периодом формируемых решеток дифракционные и плазмонные аномалии перекрываются с его спектром. В рассматриваемом эксперименте решетка с поперечными полосами может поддерживать и дифракционные аномалии, и возбуждение плазмонов, решетка с продольными –

только дифракцию. Так как спектр плазмонного резонанса существенно шире аномалии Рэлея, то перекрытие будет наблюдаться для большого диапазона периодов и вызывать больший разброс $\Delta t_{\min}$, что и видно из рис. 3. На рассматриваемом диапазоне периодов (225–1125 мкм) дифракционные эффекты позволяют сместить положение провала импульс-сателлита на 50 фс (красная кривая на рис. 3), дополнительный сдвиг на 80 фс (разница между черной и красной кривыми на рис. 3) достигается за счет возбуждения плазмонов.

Отметим, что изменение периода решеток практически не затрагивает основной импульс (см. вставку к рис. 2а), но значительно влияет на импульс-сателлит. Это может быть связано с тем, что во втором случае вклад от плазмонов проявляется сильнее. Эффективность их возбуждения и спектр зависят от формы профиля поверхности решетки [56]. В нашем случае профиль решетки качественно отличается в зависимости от направления распространения возбуждающего импульса (воздух $\rightarrow$ GaAs или GaAs $\rightarrow$ воздух). Следовательно, спектры напрямую прошедшего импульса и сателлита будут отличаться. Задача нахождения двух неизвестных спектров из одного временного сигнала с помощью преобразования Фурье является неоднозначной. Это означает, что при наличии асимметрии по направлению распространения методы постобработки, основанные на учете вторичных пиков во временном сигнале [25, 26], могут приводить к некорректным результатам.

В заключение, предложена модификация лазерной методики ТГц спектроскопии с временным разрешением, состоящая в прямом измерении временной зависимости поля прошедшего ТГц импульса, выделении из нее частей, соответствующих напрямую прошедшему и двукратно отраженному от поверхностей исследуемого объекта импульсам, и их анализе напрямую, без использования преобразования Фурье. Предложенным методом исследовались субмиллиметровые одномерные решетки, сформированные в результате структурированной лазерной засветки поверхности арсенида галлия. Продемонстрирована возможность возбуждения в таких объектах коллективных плазмонных мод – поверхностных плазмонов. Разработанный подход позволяет обойти недостатки методики THz-TDS, дополняя и расширяя ее возможности. Более того, классические методы, использующие преобразование Фурье, не применимы для динамически сформированных ТГц метаповерхностей из-за асимметрии формы их поверхности относительно направления распространения

пучка. Спектры импульсов, проходящих образец напрямую и испытывающие множественные отражения от его поверхностей, отличаются. В связи с этим использование стандартных методов постобработки, основанных на исключении вторичных пиков во временном сигнале или их учете по аналогии с множественными отражениями в резонаторе Фабри–Перо, может привести к некорректным результатам.

М. А. Кирьянов является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”. Эксперимент проводился с использованием оборудования, предоставленного по Программе развития МГУ.

Финансирование работы. Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 20-12-00371.

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. M. C. Nuss and J. Orenstein, in *Millimeter and Submillimeter Wave Spectroscopy of Solids*, ed. by G. Grüner, Springer, Berlin (1998).
2. P. Y. Han and X.-C. Zhang, *Meas. Sci. Technol.* **12**, 1747 (2001).
3. M. Walther, P. Plochocka, B. Fischer, H. Helm, and P. Uhd Jepsen, *Biopolymers* **67**, 310 (2002).
4. P. U. Jepsen, B. M. Fischer, A. Thoman, H. Helm, J. Y. Suh, R. Lopez, and R. F. Haglund, *Phys. Rev. B* **74**, 205103 (2006).
5. K. Makino, K. Kato, Y. Saito, P. Fons, A. V. Kolobov, J. Tominaga, T. Nakano, and M. Nakajima *J. Mater. Chem. C* **7**, 8209 (2019).
6. T. Suzuki and R. Shimano *Phys. Rev. Lett.* **103**, 057401 (2009).
7. G. Li, Z. Jin, X. Xue, X. Lin, G. Ma, S. Hu, and N. Dai, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 191115 (2012).
8. K. Grishunin, T. Huisman, G. Li, E. Mishina, T. Rasing, A. V. Kimel, K. Zhang, Z. Jin, S. Cao, W. Ren, G.-H. Ma, and R. V. Mikhaylovskiy, *ACS Photonics* **5**, 1375 (2018).
9. M. Hangyo, M. Tani, and T. Nagashima, *Int. J. Infrared Millimeter Waves*, **26**, 1661 (2005).
10. J. T. Kindt and C. A. Schmuttermaier, *J. Phys. Chem.* **100**, 10373 (1996).
11. D. Grischkowsky, S. Keiding, M. van Exter, and C. Fattinger, *J. Opt. Soc. Am.* **7**, 2006 (1990).
12. R. Matsunaga, Y. I. Hamada, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, and R. Shimano *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057002 (2013).
13. V. Bilyk, E. Mishina, N. Sherstyuk, A. Bush, A. Ovchinnikov, and M. Agranat, *Phys. Status Solidi RRL* **15**, 2000460 (2021).
14. К. А. Кузнецов, П. И. Кузнецов, А. Д. Фролов, А. М. Коновалов, П. М. Ковалева, Г. Х. Китаева, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 397 (2023).

15. F. D'Angelo, Z. Mics, M. Bonn, and D. Turchinovich, *Opt. Express* **22**, 12475 (2014).
16. J. Qin, L. Xie, and Y. Ying, *Food Chem.* **224**, 262 (2017).
17. O. A. Smolyanskaya, N. V. Chernomyrdin, A. A. Konovko et al. (Collaboration), *Prog. Quant. Electron.* **62**, 1 (2018).
18. M. M. Nazarov, A. P. Shkurinov, E. A. Kuleshov, and V. V. Tuchin, *Quantum Electron.* **38**, 647 (2008).
19. I. E. Ilyakov, G. K. Kitaeva, B. V. Shishkin, and R. A. Akhmedzhanov, *Opt. Lett.* **42**, 1704 (2017).
20. I. E. Ilyakov, B. V. Shishkin, S. B. Bodrov, G. K. Kitaeva, M. I. Bakunov, and R. A. Akhmedzhanov, *Laser Phys. Lett.* **17**, 085403 (2020).
21. H. A. Hafez, X. Chai, A. Ibrahim, S. Mondal, D. Férachou, X. Ropagnol, and T. Ozaki, *J. Opt.* **18**, 093004 (2016).
22. J. Neu and C. A. Schmuttenmaer, *J. Appl. Phys.* **124**, 231101 (2018).
23. R. Burger, J. Frisch, M. Hübner, M. Goldammer, O. Peters, E. Rönneberg, and D. Wu, *Sensors* **21**, 3473 (2021).
24. P. U. Jepsen, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **40**, 395 (2019).
25. O. S. Ahmed, M. A. Swillam, M. H. Bakr, and X. Li, *J. Lightwave Technol.* **28**, 1685 (2010).
26. R. Peretti, S. Mitryukovskiy, K. Froberger, M. A. Mebarki, S. Eliet, M. Vanwolleghe, and J.-F. Lampin, *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* **9**, 136 (2019).
27. T. Okada and K. Tanaka, *Sci. Rep.* **1**, 1 (2011).
28. W. Cai and V. Shalaev, *Optical Metamaterials*, Springer, N.Y. (2010).
29. B. Г. Веселаро, *УФН* **92**, 517 (1967).
30. J. Pendry, A. Holden, D. Robbins, and W. Stewart, *IEEE Trans. Microw. Theory Tech* **47**, 2075 (1999).
31. 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).
32. V. Zubyuk, L. Carletti, M. Shcherbakov, and S. Kruk, *APL Mater.* **9**, 060701 (2021).
33. А. М. Черняк, М. Г. Барсукова, А. С. Шорохов, А. И. Мусорин, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 40 (2020).
34. R. Singh, W. Cao, I. Al-Naib, L. Cong, W. Withayachumnankul, and W. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 171101 (2014).
35. S. Han, M. V. Rybin, P. Pitchappa, Y. K. Srivastava, Y. S. Kivshar, and R. Singh, *Adv. Opt. Mater.* **8**, 1900959 (2020).
36. И. А. Новиков, М. А. Кирьянов, А. Ю. Фролов, В. В. Попов, Т. В. Долгова, А. А. Федянин *Письма в ЖЭТФ* **118**, 584 (2023).
37. М. А. Кирьянов, Г. С. Останин, Т. В. Долгова, М. Иноуэ, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 201 (2023).
38. A. Yu. Frolov, M. R. Shcherbakov, and A. A. Fedyanin, *Phys. Rev. B* **101**, 045409 (2020).
39. B. I. Afinogenov, V. O. Bessonov, I. V. Soboleva, and A. A. Fedyanin, *ACS Photonics* **6**, 844 (2019).
40. N. Meinzer, W. L. Barnes, and I. R. Hooper, *Nature Photon.* **8**, 889 (2014).
41. S. Shen, X. Liu, Y. Shen, J. Qu, E. Pickwell-MacPherson, X. Wei, and Y. Sun, *Adv. Opt. Mater.* **10**, 2101008 (2022).
42. X. Zang, B. Yao, L. Chen, J. Xie, X. Guo, A. V. Balakin, A. P. Shkurinov, and S. Zhuang, *Light: Advanced Manufacturing* **2**, 148 (2021).
43. H.-T. Chen, W. J. Padilla, J. M. O. Zide, A. C. Gossard, A. J. Taylor, and R. D. Averitt, *Nature* **444**, 597 (2006).
44. I. Chatzakakis, P. Tassin, L. Luo, N.-H. Shen, L. Zhang, J. Wang, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 043101 (2013).
45. Z. Xie, X. Wang, J. Ye, S. Feng, W. Sun, T. Akalin, and Y. Zhang, *Sci. Rep.* **3**, 3347 (2013).
46. S. Busch, B. Scherger, M. Scheller, and M. Koch, *Opt. Lett.* **37**, 1391 (2012).
47. L.-J. Cheng and L. Liu, *Opt. Express*, **21**, 28657 (2013).
48. S. F. Busch, S. Schumann, C. Jansen, M. Scheller, M. Koch, and B. M. Fischer, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 261109 (2012).
49. H. K. Tyagi and J. Gómez Rivas, *J. Opt.* **16**, 094011 (2014).
50. T. Wen, J. Tong, D. Zhang, Y. Zhu, Q. Wen, Y. Li, H. Zhang, Y. Jing, and Z. Zhong, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 255303 (2019).
51. Q.-Y. Wen, Y.-L. He, Q.-H. Yang, P. Yu, Z. Feng, W. Tan, T.-L. Wen, Y.-X. Zhang, Z. Chen, and H.-W. Zhang, *Adv. Mater. Technol.* **5**, 1901058 (2020).
52. J. W. He, X. K. Wang, Z. W. Xie, Y. Z. Xue, S. Wang, and Y. Zhang, *APL Photonics* **2**, 076102 (2017).
53. J. Guo, T. Wang, H. Zhao, X. Wang, S. Feng, P. Han, W. Sun, J. Ye, G. Situ, H.-T. Chen, and Y. Zhang, *Adv. Opt. Mater.* **7**, 1801696 (2019).
54. G. Georgiou, H. K. Tyagi, P. Mulder, G. J. Bauhuis, J. J. Schermer, and J. G. Rivas, *Sci. Rep.* **4**, 3584 (2014).
55. Y. Shi, Q. Li Zhou, C. Zhang, and B. Jin, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 121115 (2008).
56. М. А. Кирьянов, А. Ю. Фролов, И. А. Новиков, Р. А. Кипп, Р. К. Нургалиева, В. В. Попов, А. А. Езхов, Т. В. Долгова, и А. А. Федянин, *APL Photonics* **7**, 026104 (2022).

Устойчивость формирования изображения с использованием терагерцу относительно сдвига пучка

О. Г. Поддубская¹⁾, А. В. Новицкий*, О. В. Минин^{×°}, И. В. Минин^{×°▽}

⁺ Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, 220006 Минск, Беларусь

* Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

[×] Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

[°] Сибирский государственный университет геосистем и технологий, 630108 Новосибирск, Россия

[▽] Новосибирский филиал Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, “Конструкторско-технологический институт прикладной микроэлектроники”, 630108 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2024 г.

После переработки 9 апреля 2024 г.

Принята к публикации 9 апреля 2024 г.

Экспериментально продемонстрирован эффект смещения изображения при асимметричном облучении диэлектрической сферы гауссовым терагерцевым пучком в системах терагерцевого имиджинга. На основе численных расчетов, выполненных с использованием операторной теории рассеяния, было показано искривление области локализации электромагнитного поля вблизи теневой поверхности диэлектрической сферы при ее смещении относительно центра перетяжки гауссова пучка, приводящие к формированию так называемого “фотонного крючка”, свойства которого зависят от поляризации и частоты падающего излучения. Экспериментально продемонстрирована возможность достижения пространственного разрешения уровня 0.38λ в исследуемом диапазоне. Полученные результаты могут использоваться для повышения разрешающей способности коммерческих сканирующих терагерцевых систем.

DOI: 10.31857/S1234567824090052, EDN: KEPNIG

Введение. В последние два десятилетия наблюдается значительный прогресс в освоении и внедрении терагерцевого (ТГц) диапазона (0.1–10 ТГц, длина волны λ от 3 мм до 30 мм). Так, впервые экспериментально полученное в начале прошлого века [1], ТГц излучение находит широкое применение в медицине, в системах неразрушающего контроля и безопасности [2], при разработке нового поколения средств коммуникации и высокоскоростной передачи данных (5G и 6G) [3–5]. Благодаря низкой энергии фотона (1 ТГц соответствует энергии порядка 4 мэВ) ТГц волны демонстрируют неионизирующий характер взаимодействия с веществом, свободно проходят через неполярные диэлектрики и сильно поглощаются металлами и полярными диэлектриками [6]. Более того, низкоэнергетические резонансы многих сложных органических молекул, колебательные и вращательные спектры полимеров, лежат в ТГц диапазоне [7–9], что, в свою очередь, открывает широкие перспективы с точки зрения будущего развития техно-

логий дистанционного сканирования, имиджинга и спектроскопии [10].

Пространственное разрешение большинства современных ТГц сканирующих систем ограничено дифракционным пределом, зависящим как от рабочей длины волны, так и от реализации самой системы в целом. На практике генерируемое ТГц излучение зачастую фокусируется на образце с использованием выпуклых полимерных линз или внеосевых параболических зеркал с металлическим покрытием [11]. Последние особенно интересны так как они практически не вносят потерь, при этом, внеосевая геометрия обеспечивает максимально возможное фокусное расстояние и отсутствие паразитной засветки [12]. Однако, следует отметить, что числовая апертура (NA) стандартной оптики зачастую не превышает величины 0.5 [6, 13]. В результате пространственное разрешение таких оптических систем сравнимо с длиной волны λ , что для частоты 1 ТГц составляет порядка 300 мкм, и, как следствие, ограничивает их возможности с точки зрения анализа как объектов с малыми поперечными размерами, так и пространственно-неоднородных материалов.

¹⁾ e-mail: paddubskaya@gmail.com

Как было показано ранее [14–17], одним из эффективных подходов, позволяющих существенно увеличить пространственное разрешение существующих ТГц систем, является локализация электромагнитного поля вблизи поверхности образца за счет взаимодействия падающего излучения с диэлектрическими объектами, пространственные размеры которых составляют $2\lambda - 20\lambda$. В результате дифракции на таких диэлектрических частицах вблизи их теневой поверхности формируются протяженные области повышенной интенсивности, так называемые “фотонные струи” в оптике (или “тераструи” в ТГц диапазоне) [18]. Так, например, в работах [19–21] было показано, что минимальная ширина пучка в области перетяжки “фотонной струи” для мезоразмерных и недиссипативных частиц (называемых иногда “суперлинзой”) может достигать $\sim \lambda/3$, что значительно превышает пространственное разрешение “классических” дифракционно-ограниченных ТГц систем.

Следует отметить, что параметры как “фотонной струи”, так и “тераструи”, чувствительны к размерам и геометрической форме частицы, к ее структурному составу и диэлектрическим свойствам, свойствам окружающей среды [22, 23]. В работе [24] нами впервые экспериментально продемонстрирована корреляция между ТГц спектром прохождения диэлектрической сферы и качеством изображений, полученных на разных частотах. В частности, рассматривая рассеяние гауссова ТГц пучка на тефлоновой сфере, диаметр которой сравним с радиусом перетяжки, было показано, что изображения с максимальным контрастом наблюдаются вблизи минимума в спектре прохождения шарика. В этой связи, с практической точки зрения, немаловажным становится вопрос влияния положения диэлектрической сферы относительно центра ТГц пучка и влияния его смещения на качество регистрируемых изображений. Подобные исследования нам не известны в литературе. В настоящей работе мы заполняем образовавшуюся нишу, проводя анализ влияния нарушения симметрии системы относительно оси симметрии сферической “суперлинзы” на качество и структуру полученных в ТГц частотном диапазоне изображений.

Методика эксперимента. Схема экспериментальной установки ТГц спектрометра с временным разрешением (T-Spec, EKSPLA, Вильнюс, Литва) представлена на рис. 1а. В качестве источника оптического излучения выступал фемтосекундный лазер, генерирующий оптические импульсы с длиной волны 1064 нм, длительностью 145 фс и выходной мощностью 85 мДж. Далее, основной импульс линейно-

поляризованного лазерного излучения при помощи светоделительной пластинки BS1 делится на два пучка (55:45), первый из которых использовался для возбуждения ТГц излучения (линза L1 фокусирует излучение на эмиттере), в то время как второй служит для регистрации амплитуды и фазы прошедшего сигнала (для фокусировки излучения накачки на детекторе используется линза L2). В системе предусмотрено две линии задержки: быстродействующая и медленная. Линия быстрого сканирования позволяет осуществлять сбор данных в реальном времени со скоростью порядка 10 спектров в секунду. Дополнительная медленная линия задержки расширяет окно сканирования с 110 до 220 пс. В качестве эмиттера и детектора ТГц волн использовались фотопроводящие антенны, построенные на основе полупроводниковых структур GaAs, выращенных при низкой температуре. Генерируемое линейно-поляризованное ТГц излучение, в котором распределение электромагнитного поля в поперечном сечении хорошо аппроксимируется функцией Гаусса, позволяет проводить сканирование в частотном диапазоне 0.1–1 ТГц.

Фокусировка ТГц импульсов субпикосекундной длительности на образце проводилась с использованием двух внеосевых параболических зеркал (M4 и M5). Для перемещения образца в плоскости (x, y) , перпендикулярно оптической оси падающего пучка, и записи временного спектра в каждой точке (картирование образца), в системе предусмотрены две скрещенные моторизованные линии линейного перемещения (рис. 1а), управление которыми осуществляется с помощью специально разработанного программного обеспечения. Для улучшения соотношения сигнал/шум в каждой точке сканирования проводилось дополнительное усреднение по 8 выборкам. Преобразование сигнала из временной области в частотную осуществлялось с использованием алгоритмов быстрого преобразования Фурье. Под спектром пропускания, регистрируемом на эксперименте, понимается отношение интенсивности сигнала с образцом к интенсивности сигнала без образца.

Оценка апертуры ТГц пучка в фокальной плоскости параболических зеркал M4-M5 проводилась с использованием методики, детально рассмотренной в [25]. В частности, анализ интенсивности прошедшего сигнала в зависимости от положения тонкой металлической диафрагмы относительно центра пучка и его поляризации позволяет сделать вывод, что средний диаметр пучка в области перетяжки уменьшается с частотой и составляет порядка 2.3–1.5 мм в частотном диапазоне 0.2–1 ТГц. Асимметрия пучка

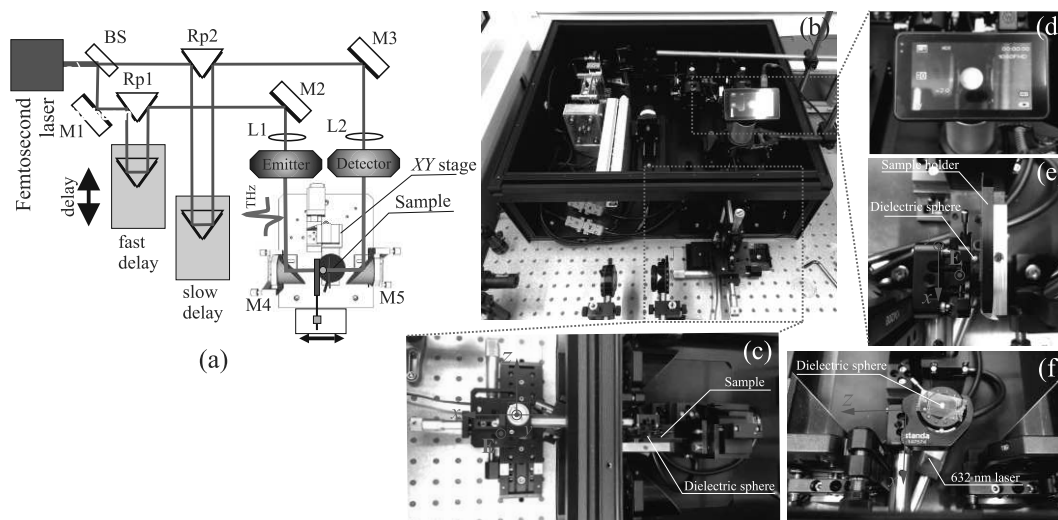


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а), (b) – Оптическая схема и вид сверху экспериментальной установки время-разрешенного ТГц спектрометра Т-Спек (ЕКСРЛА, Вильнюс, Литва). Отдельно вынесены изображение трехкоординатного линейного транслятора (с), который служит для точного позиционирования диэлектрической сферы относительно ТГц пучка и поверхности образца, и увеличенное изображение экрана камеры (d), используемой для визуального контроля положения сферы относительно образца. (e) и (f) – Ирисовая диафрагма с диэлектрической сферой по центру

в плоскости (x, y) зависит от частоты и в целом не превышает 10 %.

Для улучшения качества полученного ТГц изображения за счет эффектов, связанных с формированием высоколокализованных областей (“тераструи”), в системе использовалась фторопластовая (polytetra fluoroethylene или PTFE) сфера диаметром $d \sim 2.3$ мм, которая размещалась в непосредственной близости от поверхности образца (рис. 1d и e). Выбор сферической формы прежде всего обусловлен простотой изготовления такой фокусирующей частицы, геометрия и качество поверхности которой контролировалось оптическими методами (оптический микроскоп Olympus BX 43, оснащенный 100x и 5x объективами). В рамках данной работы не учитываются эффекты, вызванные дополнительным рассеянием ТГц излучения на неровностях поверхности, поскольку измеренная шероховатость поверхности составляла не более 15–30 мкм [26]. Точное позиционирование диэлектрической сферы относительно поверхности образца, а также центра перетяжки фокусирующих параболических зеркал проводилось с использованием трехкоординатного линейного транслятора (рис. 1c), оснащенного микрометрическими винтами (минимальный шаг перемещения составляет 10 мкм). В качестве держателя сферы использовалась ирисовая диафрагма (максимальная апертура 15 мм) с 632 нм лазером для точного позиционирования в ее центре (рис. 1e и f).

В наших экспериментах ТГц импульс распространялся через диэлектрическую сферу непосредственно перед взаимодействием с образцом. Сигнал, прошедший через систему, регистрировался в дальней зоне (расстояние от сферы до детектора $r \gg \lambda$) [27].

Для количественной оценки влияния дополнительной фокусирующей частицы на величину пространственного разрешения сканирующей системы в качестве тестового образца использовалась SiO_2 пластинка толщиной 0.5 мм, на поверхности которой методами фотолитографии (MLA100, Heidelberg Instruments Mikrotechnik, Германия) формировалась структура в виде чередующихся прозрачных и непрозрачных, сходящихся сегментов (рис. 2a, внешний диаметр составляет 3 мм). В литературе подобная структура носит название “Звезда Сименса” [28] и широко используется для оценки величины пространственного разрешения оптических систем в различных частотных диапазонах [29–31].

Результаты и обсуждение. На рисунке 2 представлены ТГц изображения металлической структуры на SiO_2 подложке, полученные без (рис. 2b) и при наличии (рис. 2c и d) PTFE сферы в пучке. Видно, что диэлектрическая частица позволяет существенно улучшить пространственное разрешение системы в целом. При этом стандартным критерием оценки величины разрешения с использованием выбранного тестового образца является оценка длины хорды сегмента минимальной окружности, построенной в

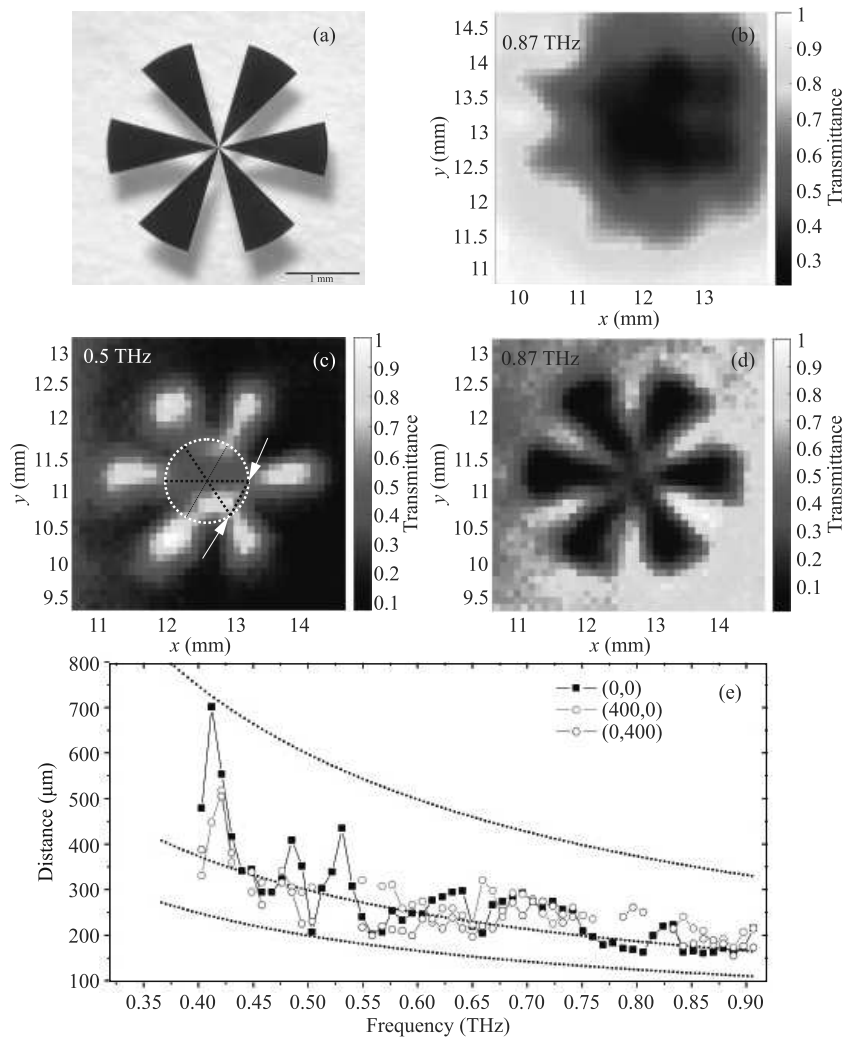


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Оптическое изображение тестового образца SiO₂ пластинки с металлической структурой на поверхности (“звезды Сименса”). ТГц изображения тестовой структуры, полученные на частоте 0.87 ТГц без (b) и с диэлектрической сферой в пучке (d), соответственно. Для системы с диэлектрической сферой также представлено ТГц изображение тестовой структуры записанное на частоте 0.5 ТГц (c). Размер изображений составляет 4 × 4 мм². Шаг сканирования вдоль осей x и y выбирался равным 102 мкм, расстояние между поверхностью сферы и образцом составляло 200 мкм. (e) – Частотная зависимость длины хорды минимальной окружности, построенной в центральной части изображений тестовой структуры

центральной части изображения (см. рис. 2c). Очевидно, что пространственное разрешение системы существенно зависит от частоты падающего электромагнитного излучения. На рисунке 2e (черная кривая) представлена экспериментально полученная частотная зависимость пространственного разрешения ТГц спектрометра, сопряженного с РТФЕ сферой в качестве фокусирующей частицы, из анализа которой можно сделать вывод, что минимальное значение разрешения соответствует частоте 0.5 ТГц и составляет порядка 0.38λ , что, в свою очередь, близко к теоретическому пределу 0.33λ [20].

Как было отмечено выше, с практической точки зрения, немаловажным фактором, влияющим на основные характеристики “тераструи” и, как результат, на качество полученного изображения, является положение диэлектрической сферы относительно центра перетяжки ТГц пучка. В рамках данной работы для моделирования рассеяния электромагнитной волны на сферической частице использовалась модель линейно-поляризованного гауссова пучка в параксиальном приближении, электрическое поле которого можно представить в следующем виде:

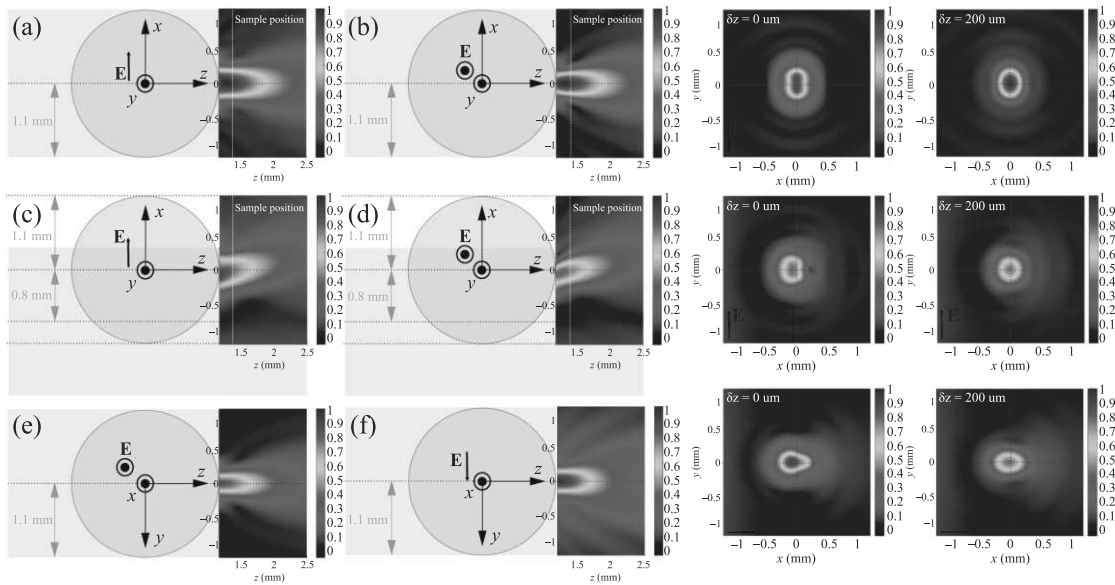


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение амплитуды рассеянного поля ($|E|$, отн. ед.) вблизи поверхности диэлектрической сферы, рассчитанное на частоте 0.7 ТГц для двух случаев: (a), (b) – диэлектрическая сфера расположена в центре ТГц пучка и (c)–(f) – диэлектрическая сфера смещена на величину 800 мкм ($\sim 0.34d$) вдоль оси x . Распределение рассеянного поля в плоскости (x, y) , перпендикулярной направлению распространения падающей электромагнитной волны, для $\delta z = 0$ мкм и $\delta z = 200$ мкм: диэлектрическая сфера (g) расположена в центре ТГц пучка и (h), (i) смещена на 800 мкм вдоль оси x . Все расчеты выполнены для двух взаимно ортогональных направлений поляризации падающей электромагнитной волны. Шаг дискретизации вдоль вертикальной и горизонтальной осей составлял 54 мкм

$$E = A \frac{w_0^2}{w_0^2 + 2iz/k_0} \exp\left(ik_0z - \frac{\rho^2}{w_0^2 + 2iz/k_0}\right), \quad (1)$$

где ρ – полярная координата в поперечном сечении пучка, z – продольная координата, A – поле в точке ($\rho = 0$, $z = 0$), $k_0 = 2\pi f/c$ – волновой вектор в вакууме, f – частота, c – скорость света, w_0 – радиус перетяжки гауссова пучка.

Рассмотрим рассеяние ТГц волны, поле которой определяется уравнением (1), на диэлектрической сфере. Центр декартовой системы координат выбирался таким образом, чтобы он совпадал с центром сферы. Для расчета рассеянного поля использовалась так называемая операторная теория, впервые предложенная в работе [32] и зарекомендовавшая себя при изучении оптических сил, действующих на однородные [33] и неоднородные частицы [34]. В основе теории лежит симметрия рассеивающего объекта, позволяющая свести уравнения Максвелла к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для соответствующих электрических и магнитных полей, фундаментальное решение которых может быть записано в виде произведения эволюционного оператора (четырёхмерной матрицы) и четырёхмерного вектора тангенциальных полей в начальной точке. Применение граничных условий позволя-

ет вычислить векторную величину амплитуды рассеянного поля. Следует отметить, что рассмотренный подход применим для произвольного падающего поля.

Распределение поля, рассчитанное вблизи поверхности диэлектрической сферы, для случая падения на ее поверхность излучения частотой $f = 0.7$ ТГц, представлено на рис. 3. В расчетах радиус перетяжки гауссова ТГц пучка w_0 полагался равным 1.1 мм, диаметр d и показатель преломления n сферы 2.3 мм и 1.47 [35], соответственно, что исходно близко к параметрам эксперимента. Показатель преломления окружающей среды выбирался равным 1. Падающий ТГц импульс распространялся вдоль положительного направления оси z . Расчеты проводились для случаев x - и y -поляризованного излучения. Из представленных данных (рис. 3а–f) видно, что непосредственно за сферой, облученной гауссовым пучком, диаметр которого сравним с диаметром сферы ($2w_0 = d$), формируется область повышенной интенсивности $I \sim |E|^2$ – “тераструк”. Полуширина струи на половине максимума интенсивности (FWHM – *full width at half maximum*) в фокусе составляет 0.70λ и 0.56λ для случаев x - и y -поляризованной волны соответственно. Заметим, что в рамках данной работы

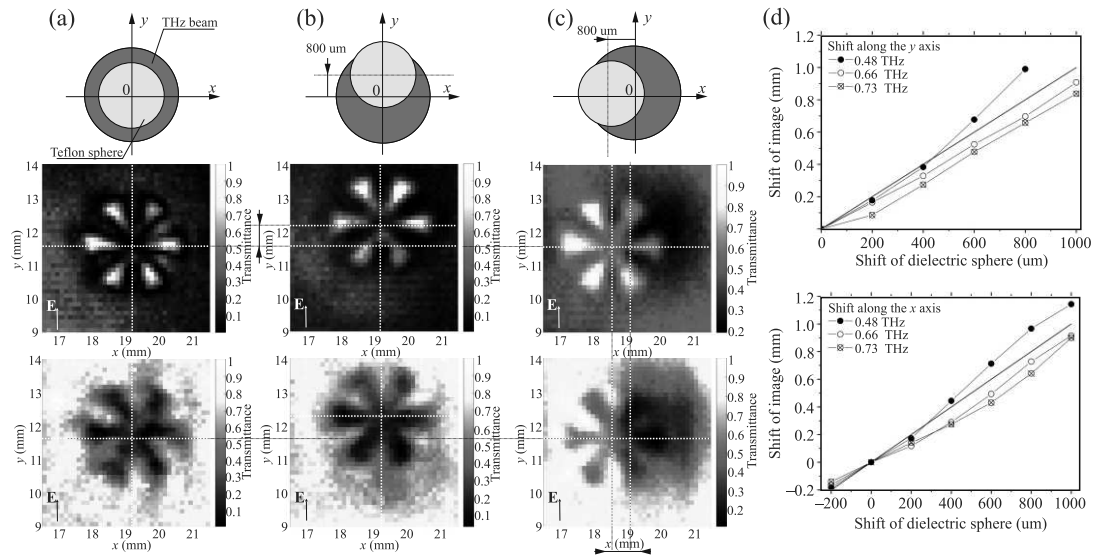


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изображения структуры “звезды Сименса” на SiO_2 подложке, полученные при помощи ПТФЕ сферы диаметром 2.3 мм, размещенной в ТГц пучке. Слева направо: (a) – диэлектрическая сфера расположена в центре перетяжки гауссова ТГц пучка; (b) – положение сферы смещенно на 800 мкм ($0.35d$) вдоль оси y относительно центра перетяжки гауссова ТГц пучка; (c) – положение сферы смещенно на 800 мкм ($0.35d$) вдоль оси x относительно центра перетяжки гауссова ТГц пучка. Размер изображений составляет 4×4 мм. Шаг сканирования вдоль осей x и y выбирался равным 102 мкм, расстояние между поверхностью сферы и образцом составляло 200 мкм. (d) – Смещение центра “звезды Сименса” (δ_{image}) в зависимости от величины смещения ПТФЕ сферы (δ_{sphere}) и частоты f . Верхний график соответствует $\delta_{\text{sphere}} \parallel E$, нижний $\delta_{\text{sphere}} \perp E$. Синяя кривая на графиках соответствует условию $\delta_{\text{image}} = \delta_{\text{sphere}}$

мы не ставили себе цель получить “тераструктуру” с минимальным диаметром перетяжки, поскольку демонстрируем только особенности изображения на основе такого локализованного поля. Анализ распределения интенсивности в плоскости (x, y) , перпендикулярной направлению распространения пучка непосредственно вблизи поверхности сферы ($z = 1.15$ мм, случай $\delta z = 0$ на рис. 3г), наглядно демонстрирует вывод об асимметрии “тераструктуры” относительно направления поляризации падающего излучения [36]. Следует отметить, что такая асимметрия становится менее выраженной при смещении плоскости (x, y) вдоль оси z (рис. 3г, случай $\delta z = 200$ мкм).

Смещение сферы относительно центра перетяжки (δ_{sphere}) приводит к тому, что ее поверхность освещается не полностью (в общем случае нарушается осевая симметрия системы), что, в свою очередь, вызывает искривление области локализации поля и приводит к формированию “фотонного крючка” [37]. На рисунках 3с–f представлено распределение поля, рассчитанное для x - и y -линейно поляризованного падающего ТГц излучения. В обоих случаях смещение сферы δ_{sphere} составляло 800 мкм ($\sim 0.34d$) вдоль x -направления. Следует отметить, что все представленные на рис. 3 распределения нормированы на максимум амплитуды рассеянного по-

ля для случая положения сферы в центре пучка $\delta_{\text{sphere}} = 0$. Из анализа полученных зависимостей видно, что (i) результатом смещения шарика является искривление “тераструктуры” в направлении центра частицы, что эквивалентно соответствующему смещению ТГц пучка и на эксперименте должно проявляться как смещение экспериментально-регистрируемого изображения (δ_{image}). При этом (ii) максимум интенсивности в фокусе “фотонного крючка” для системы со смещенным шариком падает.

Ранее [38] нами уже демонстрировалась возможность генерации “фотонного крючка”, используя металлическую маску, закрывающую часть волнового фронта падающей на диэлектрический цилиндр электромагнитной волны. Такой дополнительный экран в системе приводит к переотражению излучения и перераспределению рассеянного поля как внутри диэлектрической частицы, так и вблизи ее поверхности, что, при определенных условиях, может приводить к усилению поля в фокусе “фотонного крючка”. Однако, как было показано в рамках данной работы (данные не представлены), такой подход приводит к существенному ухудшению качества изображений, регистрируемых на определенных частотах.

Из анализа профиля “фотонного крючка” в плоскости (x, y) (рис. 3h и i) можно отметить, что смещение перпендикулярно направлению поляризации ($\delta_{\text{sphere}} \perp E$, y -поляризованная волна на рис. 3h) приводит к уширению пучка, что, в свою очередь, должно повлиять на разрешения сканирующей системы в целом. При смещении сферы вдоль направления поляризации ($\delta_{\text{sphere}} \parallel E$, x -поляризованная волна на рис. 3i) существенного уширения пучка не происходит. При этом, независимо от поляризации падающего ТГц излучения, смещение частицы приводит к сдвигу фокуса рассеянного поля вдоль оси z по направлению к поверхности сферы, и, как следствие, уменьшению глубины фокусировки системы в целом (рис. 3).

Для демонстрации рассмотренных выше эффектов на рис. 4 представлены экспериментально полученные изображения “звезды Сименса” для случаев смещения РТФЕ сферы δ_{sphere} на величину 800 мкм вдоль оси y (рис. 4b, совпадает с направлением поляризации падающего пучка) и вдоль оси x (рис. 4c, перпендикулярно направлению поляризации падающего пучка). Видно, что смещение диэлектрической сферы приводит к смещению изображения, что качественно хорошо согласуется с результатами численных расчетов, и тем самым является экспериментальным доказательством формирования “фотонного крючка” вблизи поверхности сферы. На рисунке 4d представлены зависимости смещения изображения центра “звезды Сименса” δ_{image} от величины смещения шарика δ_{sphere} , измеренные для двух перпендикулярных направлений. Из анализа последних можно сделать вывод, что в первом приближении смещение шарика приводит к пропорциональному смещению изображения ($\delta_{\text{image}} \sim b\delta_{\text{sphere}}$), при этом коэффициент пропорциональности b , в общем случае $\neq 1$. Очевидно, что b должен зависеть как от положения образца относительно сферы ($\delta z > d$), так и от частоты падающего излучения f . Последнее обусловлено частотной зависимостью положения фокуса “фотонной струи” (см. [24, 22]).

Асимметрия изображения “звезды Сименса” вдоль оси y , которая отчетливо проявляется в центральной области структуры, хорошо согласуется с общей асимметрией “фотонного крючка”, рассмотренной выше (рис. 3), и может выступать в качестве критерия расположения тестового объекта вблизи фокуса такой диэлектрической линзы. Измеренные частотные зависимости пространственного разрешения для случаев смещения шарика $\delta_{\text{sphere}} = 400$ мкм вдоль x и вдоль y представлены на рис. 2e (красная и синяя кривые, соответственно), и позволяют сделать

вывод, что такое смещение фокусирующей частицы не приводит к существенному ухудшению разрешения сканирующей системы в целом. Однако, следует отметить появление дополнительных “артефактов” при $\delta_{\text{sphere}} > 400$ мкм ($\sim 0.17d$) (рис. 4d и c), наложение которых с основным изображением приводит к потере контраста на определенных частотах.

Для наглядности на рис. 5a–d представлены изображения тестовой структуры, записанные на частоте 0.8 ТГц в зависимости от δ_{sphere} РТФЕ сферы вдоль оси x относительно центра перетяжки гауссова ТГц пучка. Соответствующие численные расчеты распределения поля представлены на рис. 5e и f, из анализа которых можно выделить наличие дополнительного слабоинтенсивного пучка, распространяющегося симметрично относительно центра падающего излучения (в наших обозначениях центр перетяжки соответствует координате $x = -0.8$ мм, и на графике (рис. 5f) отмечен вертикальной пунктирной линией), природа которого связана с интерференцией рассеянного поля и неперекрывающейся частицей волнового фронта падающей ТГц волны. Представленные на рис. 5 экспериментальные данные, полученные при помощи ближнепольной локализации, и за счет дополнительной асимметрии системы, вызванной смещением диэлектрической частицы, хорошо согласуются с результатами численных расчетов. Действительно, вертикальные пунктирные линии на рис. 5a–d соответствуют центру исходного гауссова пучка, относительно этих линий наблюдается зеркальная симметрия двух изображений.

Закключение. Настоящая работа является логическим продолжением ранее начатых работ, связанных с анализом практической возможности использования идеологии “тераструй” для получения субволнового разрешения в существующих ТГц системах. В частности, в рамках данной работы, было показано, что смещение фокусирующей сферической частицы относительно центра гауссова пучка в плоскости, перпендикулярной его распространению, приводит к искривлению “тераструи” и формированию “фотонного крючка”, что, в свою очередь, отражается в смещении экспериментально полученных ТГц изображений. Важно отметить, что в общем случае величина смещения изображения зависит от частоты. В свою очередь, анализ частотных зависимостей пространственного разрешения позволяет сделать вывод, что искривление пространственной формы тераструи не приводит к существенному ухудшению качества полученных изображений, однако существует предельная вели-

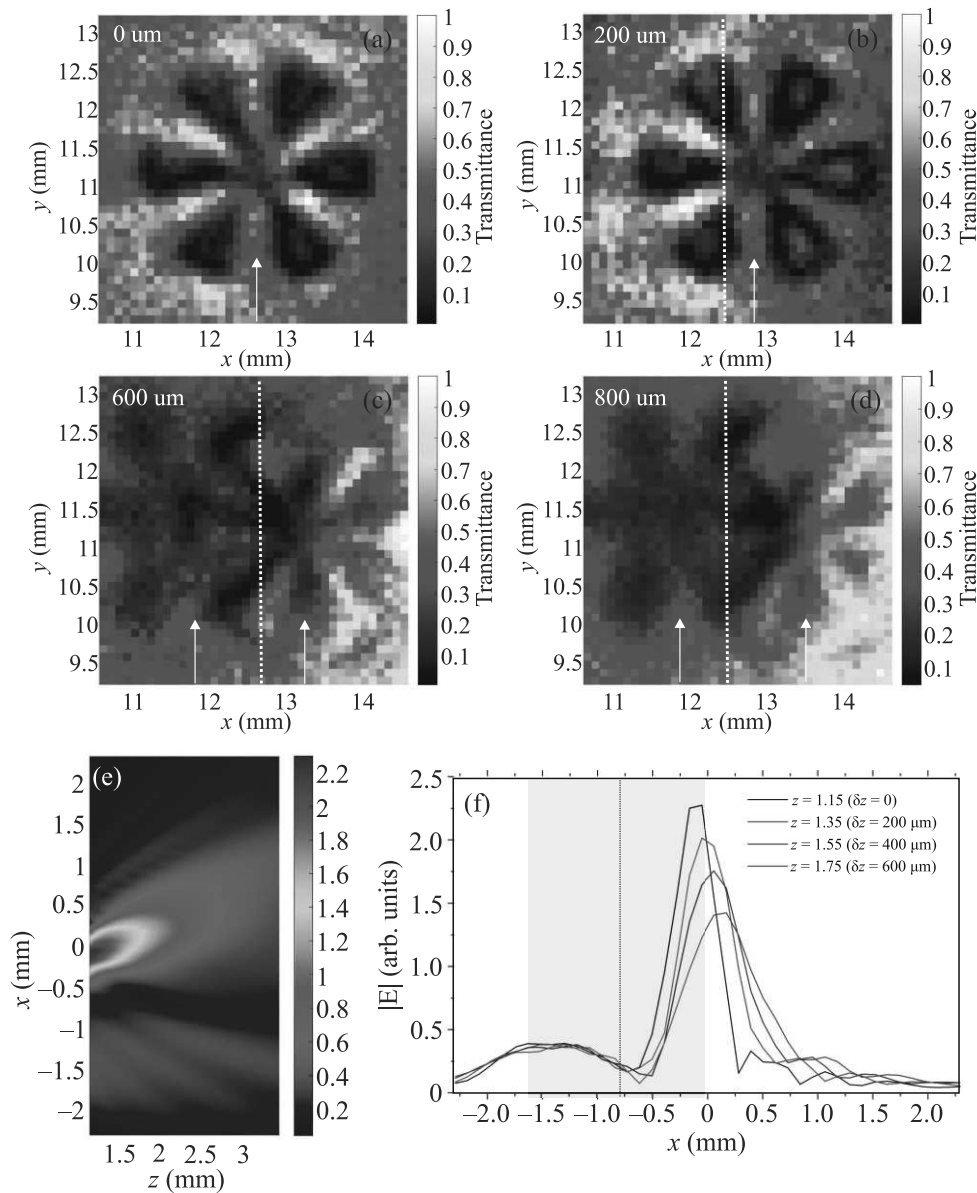


Рис. 5. (Цветной онлайн) Изображения структуры “звезды Сименса” на частоте 0.8 ТГц в зависимости от смещения δ_{sphere} вдоль оси x относительно центра перетяжки гауссова ТГц пучка: (a) – $\delta_{\text{sphere}} = 0$ мкм; (b) – $\delta_{\text{sphere}} = 200$ мкм; (c) – $\delta_{\text{sphere}} = 600$ мкм; (d) – $\delta_{\text{sphere}} = 800$ мкм. Расстояние между поверхностью сферы и образцом, принималось равным 200 мкм. Размер изображения составляет 4×4 мм. Стрелками отмечены изображения, полученные при помощи “тераструи” и за счет неперекрывающейся сферической частицы части пучка. (e) – Распределение амплитуды рассеянного поля вблизи поверхности диэлектрической сферы, рассчитанное на частоте 0.8 ТГц. График (f) отражает срезы распределения электрического поля вдоль оси x , полученные для различных z . В расчете диаметр сферы d и диаметр перетяжки $2w_0$ гауссова пучка полагались равными 2.3 и 1.5 мм, соответственно. Расчеты выполнены для случая $\delta_{\text{sphere}} = 800$ мкм и y – поляризации поля. Шаг дискретизации вдоль горизонтальной и вертикальной осей составлял 120 и 56 мкм, соответственно

чина, определяемая отношением диаметра ТГц пучка и геометрического размера фокусирующей частицы, ограничивающая возможность проведения гиперспектрального сканирования с использованием такой системы из-за появления дополнительных

артефактов. Таким образом, экспериментально было продемонстрировано, что предложенная методика достаточно проста в реализации и позволяет существенно повысить разрешающую способность коммерчески доступных сканирующих ТГц

систем, что, безусловно, расширит область их применения.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности Томского политехнического университета, а также при частичной поддержке проекта Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф23МЭ-023 (2021-2025 г.)). А. В. Новицкий также выражает благодарность программе научных исследований “Конвергенция – 2025” (задание 2.1.02.1).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. A. Glagolewa-Arkadiewa, *Nature* **113**, 640 (1924).
2. Y. H. Tao, A. J. Fitzgerald, and V. P. Wallace, *Sensors* **20**, 1424 (2020).
3. A. Leitenstorfer, A. S. Moskalenko, T. Kampfrath et al. (Collaboration), *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56**, 223001 (2023).
4. Y. Huang, Y. Shen, and J. Wang, *Engineering* **22**, 106 (2023).
5. K. Yamada, Y. Samura, O. V. Minin, A. Kanno, N. Sekine, J. Nakajima, I. V. Minin, and S. Hisatake, *Frontiers in Communications and Networks* **2**, 2673 (2021).
6. Н. В. Черномырдин, А. О. Щадько, С. П. Лебедев, И. Е. Спектор, В. Л. Толстогузов, А. С. Кучерявенко, К. М. Малахов, Г. А. Командин, В. С. Горелик, К. И. Зайцев, *Оптика и спектроскопия* **124**, 420 (2018).
7. T. R. Globus, D. L. Woolard, T. Khromova, T. W. Crowe, M. Bykhovskaia, B. L. Gelmont, J. Hesler, and A. C. Samuels, *Journal of Biological Physics* **29**, 89 (2003).
8. Y. Huang, X. Yang, and J. Li, *J. Appl. Polym. Sci.* **140**, e54737 (2023).
9. P. Kuzel and H. Nemes, *Adv. Opt. Mater.* **8**, 1900623 (2020).
10. О. В. Минин, И. В. Минин, *Квантовая электроника* **52**, 13 (2022).
11. N. Chopra and J. Lloyd-Hughes, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **44**, 981 (2023).
12. C. Bruckner, G. Notni, and A. Tunnermann, *Optik* **121**, 113 (2010).
13. Y. H. Lo and R. Leonhardt, *Opt. Express* **16**, 15991 (2008).
14. A. Pimenov and A. Loidl, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4122 (2003).
15. D.-H. Choi, J.-H. Shin, I.-M. Lee, and K. H. Park, *Sensors* **21**, 1424 (2021).
16. D.-H. Choi, M. Kim, D. W. Park, E. S. Lee, and I.-M. Lee, *Optics & Laser Technology* **174**, 110557 (2024).
17. H. H. Nguyen Pham, S. Hisatake, O. V. Minin, T. Nagatsuma, and I. V. Minin, *APL Photonics* **2**, 056106 (2017).
18. V. Pacheco-Peña, M. Beruete, I. V. Minin, and O. V. Minin, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 084102 (2014).
19. A. Mandal and V. R. Dantham, *J. Opt. Soc. Am. B* **37**, 977 (2020).
20. A. Heifetz, S.-C. Kong, A. V. Sahakian, A. Taflove, and V. Backman, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **6**, 1979 (2009).
21. A. Mandal, P. Tiwari, P. K. Upputuri, and V. R. Dantham, *Sci. Rep.* **12**, 173 (2022).
22. L. Yue, Z. Wang, B. Yan, J. N. Monks, Y. Joya, R. Dhama, O. V. Minin, and I. V. Minin, *Annalen der Physik* **532**, 2000373 (2020).
23. A. L. S. Cruz, C. M. B. Cordeiro, and M. A. R. Franco, *Proc. SPIE* **9634**, 963412 (2015).
24. A. G. Paddubskaya, N. I. Valynets, A. V. Novitsky, I. V. Minin, and O. V. Minin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **57**, 145104 (2024).
25. S. Hunsche, M. Koch, I. Brener, and M. C. Nuss, *Opt. Commun.* **150**, 22 (1998).
26. R. Chen, J. Lin, P. Jin, M. Cada, and Y. Ma, *Photonic nanojets generated by rough surface micro-cylinders*, in *2015 IEEE 28th Canadian Conference on Electrical and Computer Engineering (CCECE)*, Halifax, NS, Canada (2015), p. 1393; doi: 10.1109/CCECE.2015.7129483.
27. M. Kerker, *The scattering of light and other electromagnetic radiation*, John Wiley and Sons Inc, N.Y. (1969), 688 p.
28. A. Orych, *The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences* **XL-1/W4**, 391 (2015).
29. R. I. Stantchev, B. Sun, S. M. Horneett, P. A. Hobson, G. M. Gibson, M. J. Padgett, and E. Hendry, *Sci. Adv.* **2**, e1600190 (2016).
30. R. I. Stantchev, D. B. Phillips, P. Hobson, S. M. Horneett, M. J. Padgett, and E. Hendry, *Optica* **4**, 989 (2017).
31. S.-C. Chen, L.-H. Du, K. Meng, J. Li, Z.-H. Zhai, Q.-W. Shi, Z.-R. Li, and L.-G. Zhu, *Opt. Lett.* **44**, 21 (2019).
32. A. Novitsky and L. Barkovsky, *Phys. Rev. A* **77**, 033849 (2008).
33. A. Novitsky, C.-W. Qiu, and H. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 203601 (2011).

34. A. Novitsky, A. S. Shalin, and A. V. Lavrinenko, Phys. Rev. A **95**, 053818 (2017).
35. F. D'Angelo, Z. Mics, M. Bonn, and D. Turchinovich, Opt. Express **22**, 12475 (2014).
36. T. Uenohara, Y. Mizutani, and Y. Takaya, Precision Engineering **60**, 274 (2019).
37. O. V. Minin and I. V. Minin, *The Photonic Hook: From Optics to Acoustics and Plasmonics*, Springer, Cham, Switzerland (2021).
38. I. V. Minin, O. V. Minin, C.-Y. Liu, H.-D. Wei, Y. E. Geints, and O. Karachevsky, Opt. Lett. **45**, 4899 (2020).

Термические превращения ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ при давлении 10 ГПа и температурах до 2200 К¹⁾

С. С. Старчиков^{a,2)}, В. А. Заяханов^a, И. А. Троян^a, А. А. Быков^b, К. М. Булатов^b, А. Л. Васильев^{a,c},
Д. С. Перекалин^d, Н. И. Снегирёв^{a,e}, Е. С. Куликова^e, В. А. Давыдов^f, И. С. Любутин^a

^aИнститут кристаллографии им. А. В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники,
Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 119333 Москва, Россия

^bНаучно-технологический центр уникального приборостроения РАН, 117342 Москва, Россия

^cМосковский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

^dИнститут элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, 119991 Москва, Россия

^eКурчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований,
Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^fИнститут физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина, 142190 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 марта 2024 г.

После переработки 28 марта 2024 г.

Принята к публикации 1 апреля 2024 г.

В камерах с алмазными наковальнями исследованы особенности термических превращений ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ при давлении 10 ГПа в условиях лазерного нагрева до 2200 К. Получены карты распределения температуры на образце в процессе нагрева. Методами рентгеновского фазового анализа, просвечивающей электронной микроскопии и мессбауэровской спектроскопии изучены структура и свойства продуктов превращения. Установлено, что характерной особенностью превращений ферроцена при лазерном нагреве является одновременное образование наночастиц кристаллических фаз железа (α -Fe) и карбида железа (Fe_7C_3). Присутствие α -Fe в продуктах термических превращений ферроцена при высоких давлениях ранее не наблюдалось. Обсуждаются возможные механизмы одновременного образования этих наночастиц в процессах превращения ферроцена.

DOI: 10.31857/S1234567824090064, EDN: JZVFTB

1. Введение. Наночастицы карбидов железа Fe_7C_3 и Fe_3C , инкапсулированные в углеродные оболочки, обладают высокой биосовместимостью. Кроме того, они могут управляться внешним магнитным полем и поэтому представляют новый тип платформ для биомедицинских применений [1].

Такие наночастицы могут быть получены при разложении молекул ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ при высоком давлении и высокой температуре (ВДВТ) [2, 3], и в зависимости от условий синтеза, могут обладать различными магнитными свойствами. Поэтому изучение фазовых превращений в ферроцене в условиях ВДВТ представляет важную и актуальную задачу.

Известно, что на диаграммах состояния ферроцена могут быть выделены три принципиально различные области. Первая из них, которая характе-

ризуется низкими значениями давления и температуры, соответствует различным конформациям молекул в моноклинной фазе ферроцена [4–7]. Вторая область соответствует появлению полимеризованных состояний металлорганических соединений [8]. Третья область P - T фазовой диаграммы связана с разложением исходных молекул ферроцена в условиях ВДВТ. Именно эта область представляет особый интерес для материаловедов, так как в процессе разложения ферроцена происходит образование новых материалов, обладающих уникальными структурой и свойствами. В частности, проведенные ранее исследования превращений $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ в камерах высокого давления типа “Тороид” показали, что при давлении 8 ГПа и температурах до 1870 К ферроцен преобразуется в аморфные наночастицы карбидов железа переменного состава, а также наночастицы кристаллических фаз карбидов железа Fe_7C_3 и Fe_3C . Было установлено, что наночастицы Fe_7C_3 и Fe_3C могут

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: sergey.s.starchikov@gmail.com

быть инкапсулированы в углеродные либо сложные по составу многослойные оболочки [9–12].

Для получения наноматериалов в процессе разложения ферроцена весьма перспективной является область давлений порядка 10 ГПа и температур около 2200 К. Это связано с тем, что при этих условиях в двухкомпонентной системе Fe-C образуется бинарная смесь карбида железа Fe_7C_3 и алмаза. Можно было бы ожидать формирование магнитоуправляемых люминесцентных наночастиц при разложении ферроцена в этих условиях. Подобные материалы важны для систем адресной доставки лекарств, для проведения магнитно-резонансной томографии и лечебной локальной гипертермии. Однако, фазовые превращения в ферроцене $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ при таких давлениях и температурах ранее не исследовались.

Целью настоящей работы было изучить термические превращения ферроцена при давлении 10 ГПа в камерах высокого давления с алмазными наковальнями (КВД) при лазерном нагреве образца до 2200 К.

2. Экспериментальные методы. Синтез ферроцена проводили методом по аналогии с предложенным в работе [13]. Детальное описание дано в дополнительных материалах.

Известно, что при исследовании железосодержащих соединений эффект Мёссбауэра может наблюдаться только на ядрах ^{57}Fe . В природном железе содержится лишь около 2 % такого “мёссбауэровского” изотопа, что делает невозможным проведение мёссбауэровских исследований микрообразцов в КВД. В нашей работе при синтезе ферроцена использовался реактив Fe_2O_3 , обогащенный по изотопу ^{57}Fe до 96 %.

Для проведения экспериментов при высоком давлении изготовлены алмазные наковальни с размером каллеты 600 мкм. Использовалась вольфрамовая гаскета толщиной 60 мкм, в которой выполнено отверстие диаметром 180 мкм. В отверстие гаскеты (рабочий объем КВД) помещался порошок ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ с толщиной слоя около 45 мкм. Между ферроценом и наковальней помещался слой порошка MgO толщиной 5–10 мкм, который одновременно служил средой, передающей давление, и теплоизолятором с высокой температурой плавления (при 8.7 ГПа около 4150 К [14]).

Давление на образце контролировалось по сдвигу высокочастотного края рамановского пика от алмазной наковальни [15] с помощью монохроматора/спектрографа Princeton Instruments Acton SP2500. В качестве источника возбуждения использовался твердотельный лазер с диодной накачкой и длиной волны 671 нм. Установлено, что неод-

нородность давления на образце была не более ± 0.2 ГПа.

Лазерный нагрев образца осуществлялся с помощью УНУ [16–18]. Инфракрасное лазерное излучение с длиной волны 1064 нм создавалось одноименным (TEM00) волоконным лазером производства IPG Photonics. Излучение фокусировалось на поверхности ферроцена в пятно диаметром 25–30 мкм. Нагрев образца осуществлялся в непрерывном режиме в течение 20 с. Детальное описание установки для лазерного нагрева дано в дополнительных материалах.

Рентгеновский фазовый анализ полученных образцов выполнен на экспериментальной станции “Белок-РСА” Курчатовского источника синхротронного излучения (Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, Россия) [19]. Съемка производилась на двумерный детектор Rayonix SX165. Длина волны синхротронного излучения составляла 0.75 Å.

Исследования методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) проводились с использованием микроскопа Osiris TEM/STEM (Thermo Fisher Scientific, США), оснащенном высокоугловым кольцевым темнопольным (HAADF) детектором (Fischione, США). После обработки ферроцена в условиях ВДВТ образец извлекался из КВД. Для исследований методом ПЭМ пластинка (ламель) вырезалась из этого образца с помощью фокусированного ионного пучка в двухлучевом растровом электронно-ионном микроскопе Scios (Thermo Fisher Scientific, США).

Мёссбауэровские спектры на ядрах ^{57}Fe получены сначала при высоком давлении на образце в камере с алмазными наковальнями (после лазерного нагрева), а затем при атмосферном давлении (после разгрузки и открытия КВД). Точечный радиоактивный источник гамма-излучения $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$ находился при комнатной температуре. Калибровка изомерных сдвигов проведена по спектру стандартного поглотителя $\alpha\text{-Fe}$. Модельная обработка спектров проводилась с помощью компьютерной программы SpectrRelax [20].

3. Экспериментальные исследования термических превращений в ферроцене.

3.1. Расчет пространственного распределения температуры. Для оценки градиента температуры на образце в процессе лазерного воздействия был проведен расчет пространственного распределения температуры по методике, детально описанной в работе [18].

При включении лазерного воздействия процесс нагрева характеризуется скачкообразным возрастанием оптического сигнала, регистрируемого мультиспектральной камерой (см. детали в дополнительных материалах). Установлено, что процесс нагрева становится более однородным по прошествии 5–7 с, и после этого можно корректно производить расчет пространственного распределения температуры. С течением времени, наблюдается уменьшение зоны нагрева образца (рис. 1). Можно сделать вывод, что в начале лазерного нагрева теплопроводность образца выше, и при этом происходит нагрев большой области вокруг лазерного пятна. Максимальная температура в зоне нагрева составляла $2200\text{ K} \pm 3\%$ (рис. 1).

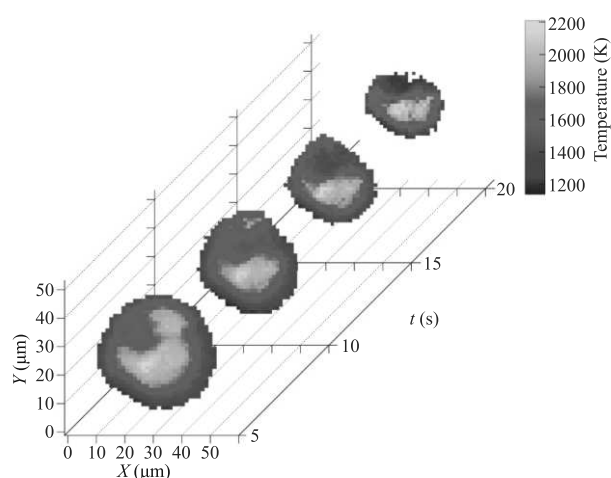


Рис. 1. (Цветной онлайн) Распределение температуры на поверхности ферроцена в КВД в разные моменты времени

3.2. Рентгеновский фазовый анализ. Рентгеновская дифрактограмма образца после его извлечения из КВД представлена на рис. 2. Под дифрактограммой приведены штрих диаграммы соединений, обнаруженных в образце по результатам фазового анализа.

Максимумы отражения на дифрактограмме существенно уширены, что может быть связано с диффузным рассеянием на частицах малого размера. Максимум в области углов 2θ около 13° соответствует отражению от плоскостей (002) графитоподобного углерода.

Рефлексы в диапазоне углов 2θ 18° – 26° характерны для ромбической фазы Fe_7C_3 и α -Fe. В этой области углов 2θ также обнаружены рефлексы, которые могут быть связаны с отражениями от углеродных слоев с двумерным и трехмерным типом упорядочения. Кроме того, наблюдаются максимумы от кубических фаз FeO при 17.3° (111), 20.1° (200), 28.5°

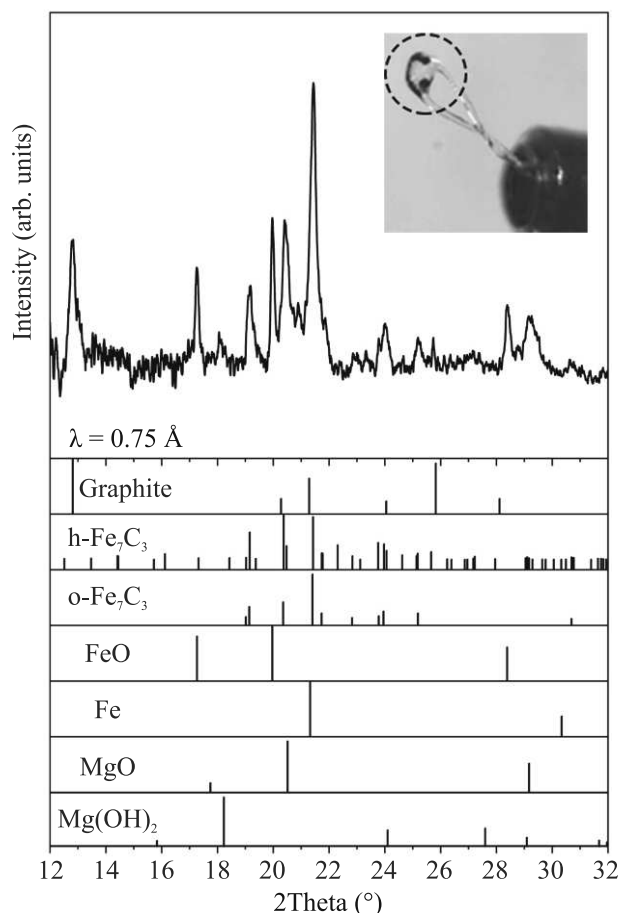


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рентгенограмма образца и штрих диаграммы наиболее вероятных соединений. На вставке пунктиром показан микрообразец размером около 40 мкм на держателе. Штрих диаграммы построены по данным базы ICDD: графит (PDF # 00-023-0064), α - Fe_7C_3 (PDF # 01-075-1499), h - Fe_7C_3 (PDF # 00-017-0333), FeO (PDF # 00-006-0615), α -Fe (PDF # 00-006-0696), MgO (PDF # 00-004-0829), $\text{Mg}(\text{OH})_2$ (PDF # 00-044-1482).

(220) и MgO при 20.5° (200), 29.2° (220). Присутствие в образце MgO, по всей видимости, связано с тем, что этот материал использовался в качестве термоизолирующего слоя в КВД.

3.3. Просвечивающая/растровая электронная микроскопия и энергодисперсионный рентгеновский микроанализ. Результаты исследований методами просвечивающей/растровой электронной микроскопии (П/РЭМ) и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭРМ) представлены на рис. 3 и 4. Темнопольное ПРЭМ изображение (с регистрацией электронов, рассеянных на большие углы) представлено на рис. 3а. Светлый контраст, обусловленный наиболее тяжелыми атомами в

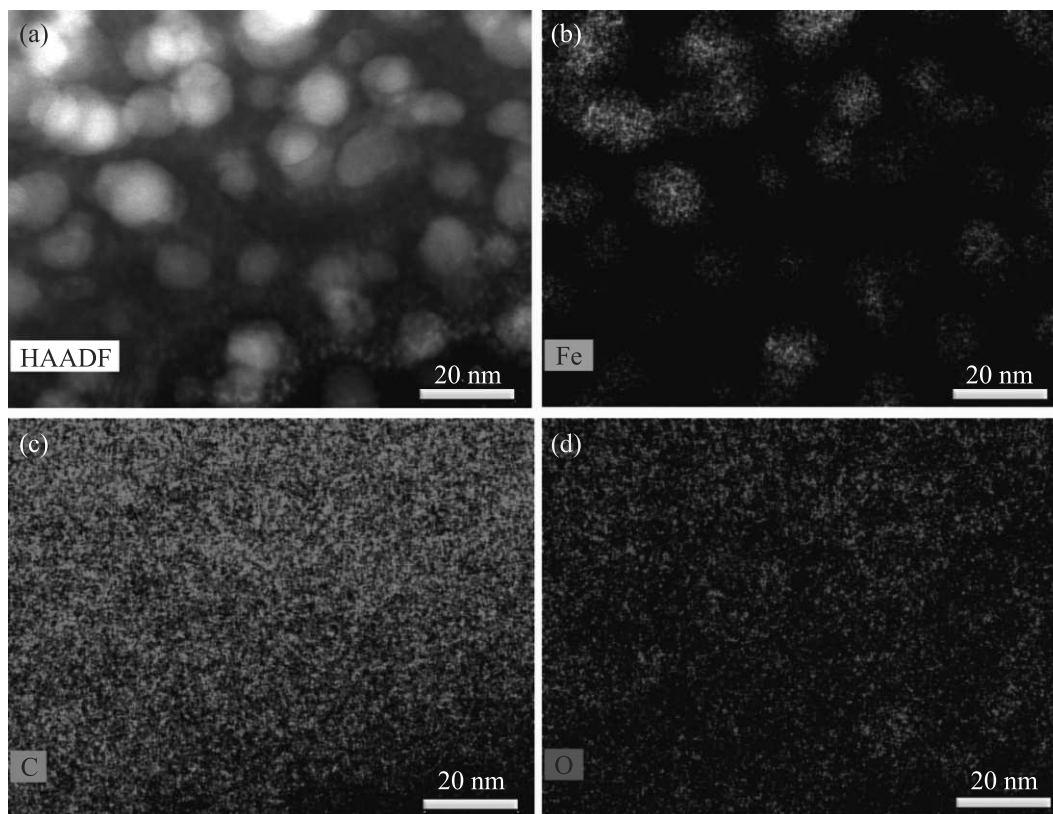


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Темнопольное ПРЭМ изображение наночастиц образца, полученное регистрацией электронов, рассеянных на большие углы. Карты распределения элементов микрообразца из КВД после ВДВТ обработки ферроцена: (b) – Fe; (c) – C и (d) – O

образце, свидетельствует, что образец состоит из наночастиц Fe сферической формы с характерным размером 10–20 нм. Этот вывод подтверждают и результаты ЭРМ элементного картирования, представленные на рис. 3b–d. Распределение железа Fe на рис. 3b полностью повторяет ПРЭМ изображения наночастиц на рис. 3a. Углерод C распределен однородно (рис. 3c). На карте распределения кислорода O (рис. 3d) наблюдается дисперсность, но она не связана с наночастицами Fe и могла возникнуть от остатков порошка MgO (термоизолирующего слоя в КВД), а не от оболочки FeO_x железосодержащих наночастиц.

Светлопольное ПЭМ изображение группы наночастиц Fe, полученных при ВДВТ обработке ферроцена, представлено на рис. 4a. Можно отметить достаточно малую дисперсность наночастиц. Кроме наночастиц, в образце обнаружены нановолокна углерода, которые отчетливо различаются на ПЭМ изображениях, полученных с высоким разрешением (ВР ПЭМ) (рис. 4b). Часть углеродных волокон ассоциируется с наночастицами Fe, для примера они показаны стрелками с цифрами “1”. Другие, располагающи-

еся отдельно от наночастиц, показаны стрелками с цифрами “2”. ВР ПЭМ изображение отдельной наночастицы, представлено на рис. 4c, квадратом выделена область анализа кристаллической решетки наночастицы. Подробное изучение изображения с применением Фурье-анализа (рис. 4d) однозначно показало совпадение с кристаллической решеткой объемно-центрированной кубической решеткой Fe, наблюдаемой в проекции [001]. ВР ПЭМ изображение участка кристаллической решетки наночастицы после фильтрации (рис. 4e) демонстрирует квадратную сетку с периодичностями 0.2 нм. На изображении наночастицы (рис. 4c) отчетливо видно, что часть ее поверхности сопряжена с многослойной графеновой оболочкой, толщиной в 6–8 слоев с характерным межплоскостным расстоянием 0.34 нм, другая часть с аморфным углеродом.

3.4. Мёссбауэровская спектроскопия. На рисунке 5 показаны мёссбауэровские спектры образца, полученные в КВД при давлении 10.1 ГПа после лазерного воздействия (а), а также после разгрузки и открытия КВД при атмосферном давлении (b). Спектры получены при температуре 295 К.

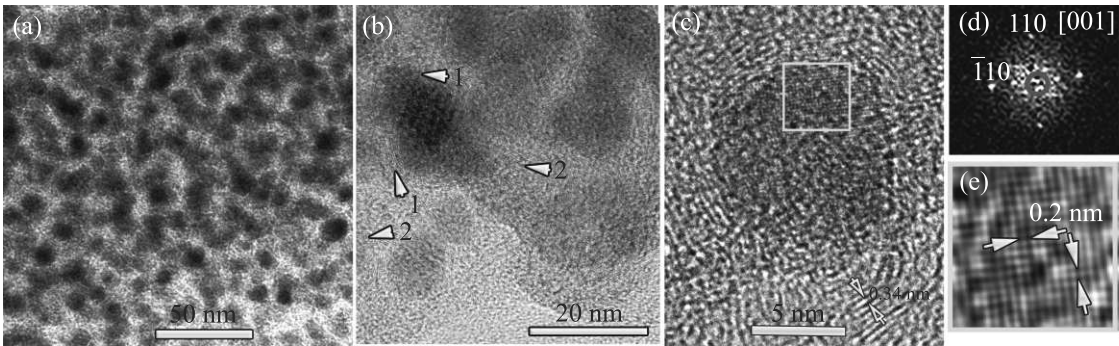


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изображение наночастиц Fe, полученных при ВДВТ обработке ферроцена: (a) – светлпольное ПЭМ изображение; (b) – ВР ПЭМ изображение наночастиц. Стрелками с цифрами обозначены углеродные волокна, ассоциированные с наночастицами Fe (1) и располагающимися отдельно от наночастиц (2); (c) – ВРПЭМ изображение отдельной наночастицы. Квадратом выделена область анализа кристаллической решетки наночастицы. (d) – Двумерный спектр Фурье от выделенной на рис. 4с области. Спектр совпадает с электронограммой от ОЦК-Fe в проекции [001]; (e) – ВР ПЭМ изображение участка кристаллической решетки наночастицы после фильтрации

Таблица 1. Параметры сверхтонкого взаимодействия для различных компонент, полученные в результате модельной обработки экспериментальных мёссбауэровских спектров. δ – изомерный сдвиг, Δ – квадрупольное расщепление в дублетах, ε -квадрупольный сдвиг в секстетах, H_{hf} – сверхтонкое магнитное поле на ядрах ^{57}Fe

	Компонента	δ , мм/с	Δ , мм/с	ε , мм/с	H_{hf} , Тл
10.1 ГПа	Fe_7C_3 (1)	0.21 (2)	–	–0.03 (2)	17.84 (15)
	Fe_7C_3 (2)	0.18 (1)	–	0.08 (1)	14.19 (10)
	Fe_7C_3 (3)	0.28 (2)	–	–0.19(5)	19.46 (50)
	$\alpha\text{-Fe}$	0.09 (4)	–	0.33 (4)	28.40 (16)
	$\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$	0.35 (1)	2.20 (1)	–	–
	$(\text{MgFe})_{1-x}\text{O}$	0.71 (2)	0.73 (20)	–	–
1 атм	Fe_7C_3 (1)	0.23 (1)	–	–0.02 (1)	20.31 (6)
	Fe_7C_3 (2)	0.19 (1)	–	0.12 (1)	16.22 (3)
	Fe_7C_3 (3)	0.30 (2)	–	–0.18 (2)	22.53 (14)
	$\alpha\text{-Fe}$	0.05 (2)	–	–0.05 (2)	32.62 (8)
	$\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$	0.43 (1)	2.36 (1)	–	–
	$(\text{MgFe})_{1-x}\text{O}$	0.80 (1)	0.76 (16)	–	–

Для анализа экспериментальных спектров использовалась модель, состоящая из нескольких парциальных компонент, соответствующих магнитоупорядоченным и парамагнитным состояниям атомов железа. Полученные в результате модельной обработки параметры сверхтонкого взаимодействия для этих компонент представлены в табл. 1.

Мёссбауэровские спектры образца при давлении 10.1 ГПа и при атмосферном давлении могут быть описаны одинаковым набором парциальных компонент. При атмосферном давлении, три магнитных секстета с параметрами изомерного сдвига δ в диапазоне 0.18–0.30 мм/с и сверхтонкими магнитными полями $H_{hf} = 16.0\text{--}22.5$ Тл соответствуют фазе карбида железа Fe_7C_3 . Параметры малоинтенсивного секстета $\delta = 0.05$ мм/с, $\varepsilon = -0.05$ мм/с и $H_{hf} = 32.62$ Тл соответствуют фазе железа $\alpha\text{-Fe}$.

Анализ параметров парамагнитных компонент показывает, что один из дублетов связан с ионами железа в фазе ферроцена, его параметры $\delta = 0.43$ мм/с и $\Delta = 2.36$ мм/с. Второй дублет, со сверхтонкими параметрами $\delta = 0.80$ мм/с и $\Delta = 0.76$ мм/с характерен для атомов железа Fe^{2+} в фазе вюститита Fe_{1-x}O [21]. Необходимо отметить большую ширину резонансных линий этого дублета (≈ 1.6 мм/с). Учитывая, что по результатам рентгеновского анализа в образце обнаружены фазы MgO и FeO , можно предположить, что второй дублет соответствует смеси твердых растворов $(\text{MgFe})_{1-x}\text{O}$ различного состава. Наличие этих фаз в образце вероятно объясняется тем, что в процессе тепловой обработки в структуру MgO (термоизолирующий слой в КВД) могут встраиваться ионы железа Fe^{2+} [22].

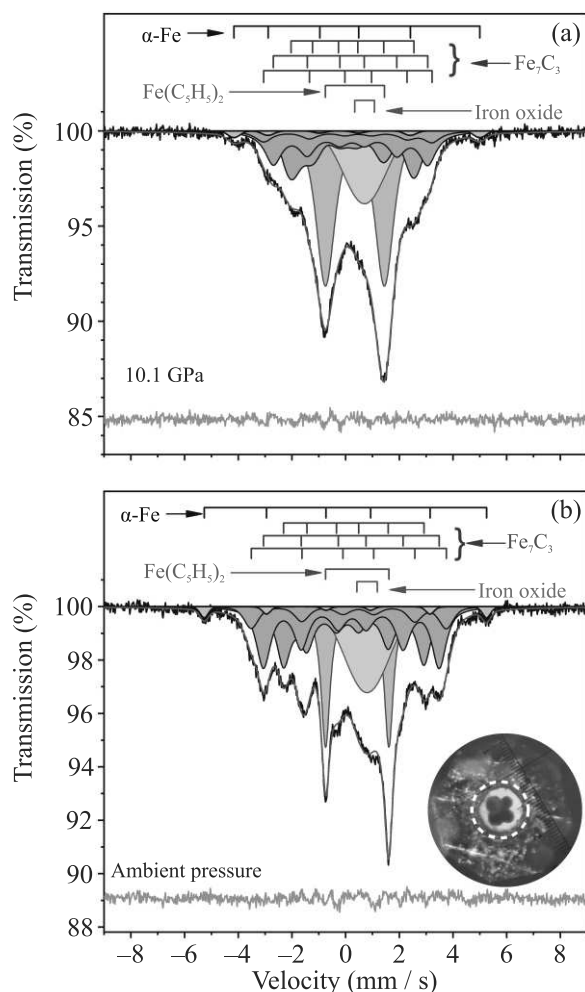


Рис. 5. (Цветной онлайн) Мёссбауэровские спектры образца при давлении 10.1 ГПа после лазерного воздействия (а), а также после разгрузки и открытия КВД при атмосферном давлении (б). На вставке показана микрофотография образца (выделен пунктирной линией) в отверстии гаскеты

4. Результаты и их обсуждение. По результатам комплексного анализа установлено, что при давлении 10 ГПа в условиях лазерного нагрева до 2200 К твердофазными продуктами превращения ферроцена являются наночастицы кристаллических фаз карбида железа Fe_7C_3 и железа $\alpha\text{-Fe}$, инкапсулированные в углеродные оболочки и диспергированные в углеродной матрице. Углеродная оболочка и матрица состоит из аморфного и графитоподобного углерода. В ней встречаются фрагменты двух- и трехмерно упорядоченных углеродных слоев. Также, в малой концентрации присутствует смесь оксидов железа и магния.

Обращает на себя внимание некоторое различие в фазовом составе образца, определенное по результатам рентгеновских, электронно-микроскопических

и мёссбауэровских исследований. Это связано с тем, что рентгеновский анализ и электронная микроскопия проводились (локально) на отдельных микрочастицах образца, извлеченных из КВД. Метод мёссбауэровской спектроскопии позволил получить данные со всего вещества в отверстии гаскеты.

Обнаруженные фазы являются продуктами конденсации и “вторичного” структурного упорядочения компонентов из “маточной” среды, в качестве которой выступают продукты разложения ферроцена. В образце, полученном в настоящей работе при давлении 10 ГПа и температуре 2200 К, одновременно присутствуют наночастицы железа и карбида железа. Сосуществование этих фаз не наблюдалось в работах по термической обработке ферроцена при 8 ГПа в области температур до 1870 К, а также при фотолизе ферроцена при температурах $\sim 2100\text{--}3000$ К [11, 23, 24].

Одновременное присутствие фаз железа и карбида железа можно объяснить из следующих соображений. Известно, что термоиндуцируемая фрагментация молекул ферроцена начинается с разрыва связей C-H, затем – C-C, и в последнюю очередь – Fe-C [24]. Появление частиц железа можно объяснить разрывом всех связей в молекуле ферроцена. В этом случае в “маточной” среде присутствуют химически не связанные атомы железа, конденсация которых и приводит к образованию наночастиц $\alpha\text{-Fe}$. В свою очередь, образование карбидов железа указывает на присутствие в “маточной” среде кластеров Fe-C. Поэтому, можно предположить существование в КВД двух типов реакционных зон, отличающихся составом “маточной” среды. Предположительный вариант расположения этих зон показан на рис. 6.

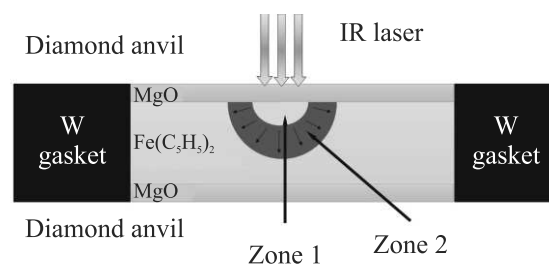


Рис. 6. (Цветной онлайн) Схема лазерного нагрева ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ в КВД. Диаметр сфокусированного лазерного пятна составлял 25–30 мкм

На рисунке 6 желтым и красным цветом схематически показаны верхняя (приповерхностная) и нижняя зоны нагрева образца.

Верхняя зона относится к области повышенных температур, в которой происходит термо-, а, возможно, и фото-индуцируемый разрыв связей Fe-C.

В этом случае, как описано выше, в “маточной” среде присутствуют химически несвязанные атомы железа. Конденсация этих атомов приводит к образованию наночастиц α -Fe.

Нижняя зона характеризуется более низкими температурами, при которых фрагментация ферроцена не сопровождается полным разрывом связей Fe-C. Конденсация металлосодержащих компонентов “маточной” среды в этом случае приводит к образованию карбида Fe_7C_3 .

Таким образом, различие в фазовом составе продуктов разложения ферроцена при 2200 К и давлении 10 ГПа, по сравнению с описанным в работах [11, 23, 24], связано с различием составов “маточной” среды в этих экспериментах.

Отметим, что в отличие от результатов исследования двухкомпонентной системы Fe-C [25] при схожих давлениях и температурах, в нашем образце не было обнаружено фазы алмаза. Данный факт может быть объяснен специфическими особенностями образования алмаза в двух (Fe-C)- и трех (Fe-C-H)-компонентной ростовых системах. Проведенные нами предварительные эксперименты указывают, что образование алмаза при разложении ферроцена происходит при более высоких давлениях.

Заключение. В камере высокого давления с алмазными наковальнями при давлении 10 ГПа проведена серия экспериментов по разложению ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ в условиях лазерного нагрева до 2200 К. Выполнен расчет пространственного распределения температуры на образце при нагреве. Установлено, что основными компонентами продуктов превращения ферроцена при указанных условиях являются наночастицы кристаллических фаз карбида железа Fe_7C_3 и железа α -Fe. Эти наночастицы диспергированы в матрице из графитоподобного и аморфного углерода. Одновременное присутствие в образце наночастиц железа и карбида железа связано с наличием двух температурных зон в камере высокого давления, отличных по составу “маточной” среды.

Авторы благодарны к.ф.-м.н. В. В. Артемову и к.х.н. А. Г. Ивановой (Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, НИЦ “Курчатовский институт”) за помощь в проведении работы.

Лазерный нагрев был выполнен на Уникальной научной установке “Лазерный нагрев в ячейках высокого давления” на базе Научно-технологического центра уникального приборостроения РАН [507563, <https://unu.ntcup.ru/>].

Финансирование работы. Работа в основном выполнена при поддержке Российского научного

фонда за счет гранта # 22-72-00060. Рентгенодифракционные исследования термоизолирующего слоя в камере высокого давления проведены в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатовский институт”.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. I. Alieva, I. Kireev, A. Rakhmanina, A. Garanina, O. Strelkova, O. Zhironkina, V. Cherepaninets, V. Davydov, V. Khabashesku, V. Agafonov, and R. Uzbekov, *Nanosyst. Physics, Chem. Math.* **7**, 158 (2016).
2. V. A. Davydov, V. N. Agafonov, T. Plakhotnik, and V. N. Khabashesku, *Funct. Diam.* **3**, 2193212 (2023).
3. R. Bagramov, V. Filonenko, I. Zibrov, E. Skryleva, B. Kulnitskiy, V. Blank, and V. Khabashesku, *Materials (Basel)* **16**, 7063 (2023).
4. D. Paliwoda, M. Hanfland, and A. Katrusiak, *J. Phys. Chem. C* **123**, 25719 (2019).
5. D. Paliwoda, K. Kowalska, M. Hanfland, and A. Katrusiak, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 4032 (2013).
6. A. V. Kuzmin, K. P. Meletov, and M. A. Faraonov, *J. Phys. Chem. C* **126**, 3688 (2022).
7. A. V. Kuzmin, K. P. Meletov, S. S. Khasanov, and M. A. Faraonov, *J. Phys. Chem. C* **125**, 16576 (2021).
8. P. Gain, R. Jana, and A. Datta, *J. Phys. Chem. A* **125**, 3362 (2021).
9. S. S. Starchikov, V. A. Zayakhanov, A. L. Vasiliev, I. S. Lyubutin, A. O. Baskakov, Y. A. Nikiforova, K. O. Funtov, M. V. Lyubutina, L. F. Kulikova, V. N. Agafonov, and V. A. Davydov, *Carbon N.Y.* **178**, 708 (2021).
10. S. S. Starchikov, V. A. Zayakhanov, I. S. Lyubutin, A. L. Vasiliev, M. V. Lyubutina, N. K. Chumakov, K. O. Funtov, L. F. Kulikova, V. N. Agafonov, and V. A. Davydov, *Appl. Surf. Sci.* **615**, 156269 (2023).
11. A. O. Baskakov, I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, V. A. Davydov, L. F. Kulikova, T. B. Egorova, and V. N. Agafonov, *Inorg. Chem.* **57**, 14895 (2018).
12. V. Davydov, A. Rakhmanina, H. Allouchi, C. Autret, P. Limelette, and V. Agafonov, *Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostructures* **20**, 451 (2012).
13. G. Wilkinson, *Org. Synth.* **36**, 31 (1956).
14. T. Kimura, H. Ohfuji, M. Nishi, and T. Irifune, *Nat. Commun.* **8**, 15735 (2017).
15. Y. Akahama and H. Kawamura, *J. Appl. Phys.* **100**, 043516 (2006).
16. K. M. Bulatov, A. A. Bykov, M. I. Gaponov, P. V. Zinin, I. B. Kutuza, A. A. Machihin, and Y. V. Mantrova, *Физические основы приборостроения* **6**, 72 (2017).

17. P. V. Zinin, A. A. Bykov, A. S. Machikhin, I. A. Troyan, K. M. Bulatov, Y. V. Mantrova, V. I. Batshev, M. I. Gaponov, I. B. Kutuza, S. V. Rashchenko, V. B. Prakapenka, and S. K. Sharma, *High Press. Res.* **39**, 131 (2019).
18. K. M. Bulatov, P. V. Zinin, A. S. Machikhin, and I. B. Kutuza, *Light Eng.* **30**, 79 (2022).
19. R. D. Svetogorov, P. V. Dorovatovskii, and V. A. Lazarenko, *Cryst. Res. Technol.* **55**, 1900184 (2020).
20. M. E. Matsnev and V. S. Rusakov, *AIP Conf. Proc.* **1489**, 178 (2012).
21. C. Wilkinson, P. D. Battle, D. A. O. Hope, A. K. Cheetham, and G. J. Long, *Inorg. Chem.* **23**, 3136 (1984).
22. V. G. Bhide and B. R. Tambe, *J. Mater. Sci.* **4**, 955 (1969).
23. K. Elihn, L. Landström, O. Alm, M. Boman, and P. Heszler, *J. Appl. Phys.* **101**, 034311 (2007).
24. K. Elihn and K. Larsson, *Thin Solid Films* **458**, 325 (2004).
25. O. T. Lord, M. J. Walter, R. Dasgupta, D. Walker, and S. M. Clark, *Earth Planet. Sci. Lett.* **284**, 157 (2009).

Спиновая накачка в структурах YIG/Pt: роль сингулярностей ван Хова

Ю. В. Никулин^{+,*}, Ю. В. Хивинцев^{+,*}, М. Е. Селезнев^{+,*}, С. Л. Высоцкий^{+,*}, В. К. Сахаров^{+,*},
А. В. Кожевников⁺, Г. М. Дудко⁺, А. Г. Хитун[×], С. А. Никитов[°], Ю. А. Филимонов^{+,*∇1)}

⁺ Саратовский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 410019 Саратов, Россия

^{*} Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия

[×] Department of Electrical and Computer Engineering, University of California – Riverside, 92521 Riverside, California, USA

[°] Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

[∇] Саратовский государственный технический университет имени Ю. А. Гагарина, 410054 Саратов, Россия

Поступила в редакцию 28 февраля 2024 г.

После переработки 28 марта 2024 г.

Принята к публикации 4 апреля 2024 г.

Экспериментально исследована спиновая накачка поверхностными и обратными объемными магнитостатическими волнами в структурах YIG/Pt. Показано, что на частотах, соответствующих сингулярностям ван Хова в плотности состояний спектра спиновых волн, происходит рост эффективности генерации спинового тока. Полученные результаты важны для разработки устройств магнонной спинтроники.

DOI: 10.31857/S1234567824090076, EDN: GXQELV

1. Введение. Перенос углового момента электрона в магнитных многослойных структурах играет центральную роль в физике и устройствах спинтроники. Значительный интерес с точки зрения создания энергоэффективных устройств представляют структуры на основе ферромагнитных диэлектриков и металлов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, где токи углового момента или спиновые токи передаются спиновыми волнами (СВ) или магнонами [1–7]. В таких структурах обменное взаимодействие электронов проводимости со спинами, локализованными на границе диэлектрик-металл, и спин-орбитальное взаимодействие приводят к спин-зависимому электрон-магнонному рассеянию и транспорту спинового тока через границу раздела. В качестве одной из базовых структур диэлектрической магнонной спинтроники рассматриваются структуры на основе пленок железо-иттриевого граната ($\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (YIG)) и платины (Pt) [1–6], что обусловлено рекордно низким затуханием СВ в YIG и достаточно большой величиной спинового угла Холла в Pt. В структурах YIG/Pt за счет спинового эффекта Холла [7] можно преобразовать электрический ток в Pt в спиновые волны в YIG [8, 9] и управлять

их распространением [10–12]. С другой стороны, благодаря обратному спиновому эффекту Холла (ISHE) можно обнаружить спиновый ток, инжектируемый в пленку Pt через границу раздела при спиновой накачке как некогерентными [8, 13–17], так и когерентными СВ при возбуждении ферромагнитного резонанса (ФМР) [18–22] или распространении [23–25] и интерференции [26] СВ.

Спиновый ток J_s , передаваемый через единицу площади интерфейса YIG/Pt, определяется разницей в отражательной способности интерфейса по отношению к электронам с противоположной ориентацией спинов в процессах электрон-магнонного рассеяния [27]. Величина J_s пропорциональна числу каналов рассеяния, которое определяется числом магнитных ионов Fe, обменно-связанных с электронами Pt на поверхности YIG, и определяется выбором параметров технологического процесса, влияющих на шероховатость, элементный состав и микроструктуру интерфейса [28–34]. С другой стороны, величина J_s отражает интенсивность процессов электрон-магнонного рассеяния в каждом из каналов и определяется параметрами взаимодействующих электронной и магнонной подсистем. В рамках подхода к описанию электрон-магнонного рассеяния в структурах YIG/Pt на основе *sd*-модели было показано

¹⁾e-mail: yuri.a.filimonov@gmail.com

[35, 36], что одним из параметров магнонной подсистемы, определяющих спиновый ток J_s через интерфейс, является плотность состояний (DOS) в спектре спиновых волн $\rho(\omega)$:

$$J_s \sim \int \Omega(\omega) \cdot \rho(\omega) d(\omega), \quad (1)$$

где $\Omega(\omega)$ содержит статистический коэффициент, характеризующий распределение магнонов и электронов, и информацию о скоростях неупругих переходов с участием возбужденных магнонов на частоте ω . В экспериментах по спиновой накачке когерентными СВ связь между J_s и $\rho(\omega)$ может играть существенную роль для частот $f^*(f = \omega/(2\pi))$, на которых групповая скорость СВ $v_g(f^*) \rightarrow 0$, и в плотности состояний в спектре СВ $\rho(f)$ возникают сингулярности ван Хова (VHS) ($\rho(f^*) \rightarrow \infty$) [37]. При частоте накачки $f \approx f^*$ следует ожидать резонансного увеличения $J_s(f^*)$ и, как следствие, резонансного увеличения электродвижущей силы (ЭДС) $V(f^*)$, генерируемой за счет обратного спинового эффекта Холла ($V \sim J_s$). Цель данной работы состоит в экспериментальном исследовании частотных зависимостей $V(f)$ в структурах YIG/Pt при спиновой накачке дипольными магнитостатическими волнами (МСВ) и обнаружении корреляции зависимостей $V(f)$ и $\rho(f)$.

2. Методика эксперимента и образцы. Типичная геометрия эксперимента по спиновой накачке предполагает, что внешнее магнитное поле $\mathbf{H}$ лежит в плоскости структуры. Спектр дипольных МСВ касательно намагниченной пленки YIG состоит из поверхностных (ПМСВ) и обратных объемных (ООМСВ) МСВ [38]. ООМСВ с волновым вектором $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$ занимают область частот $[f_H, f_0]$, где $f_0 = \sqrt{f_H^2 + f_H f_m}$, $f_H = \gamma H$, $f_m = \gamma 4\pi M$, γ и $4\pi M$, соответственно, гиромагнитное отношение и намагниченность YIG. ПМСВ при $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$ занимают полосу частот $[f_0, f_s]$, где $f_s = f_H + f_m/2$. Частотные зависимости DOS в спектре ООМСВ $\rho_v(f)$ и ПМСВ $\rho_s(f)$ получены в работе [38] из анализа дисперсионных поверхностей $f = f(\mathbf{k})$ и могут быть записаны в виде:

$$\begin{aligned} \rho_v(f) &= \frac{f f_m}{f_H \sqrt{f_0^2 - f^2}}, \\ \rho_s(f) &= \frac{f_H}{\sqrt{f^2 - f_0^2}} \times \\ &\times \frac{f_m}{\sqrt{2(f^2 - f_H^2) - f_H f_m - 2f \sqrt{f^2 - f_0^2}}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Плотность состояний в спектре ООМСВ имеет сингулярность на частоте f_0 ($\rho_v(f_0) \rightarrow \infty$) длинноволновой ($k \rightarrow 0$) границы спектра и отражает вы-

рождение по частоте мод дипольных ООМСВ с различным числом N полуволн по толщине d пленки и $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$.

В случае ПМСВ сингулярность в DOS достигается на частотах f_0 и f_s . Полюс при $f \rightarrow f_s$ соответствует коротковолновой ($k \rightarrow \infty$) границе спектра. Сингулярность при $f \rightarrow f_0$ отвечает ПМСВ с волновым вектором $\mathbf{k}$, составляющим с полем $\mathbf{H}$ угол $\Theta \rightarrow \Theta_c$, где $\Theta_c = \arcsin(\sqrt{H/(H + 4\pi M)})$ – угол отсечки ПМСВ и $\Theta \geq \Theta_c$ [38]. При $k \neq 0$ и $\Theta \rightarrow \Theta_c$ распределение магнитостатического потенциала Ψ по толщине пленки $\Psi = A e^{-k_z z} + B e^{k_z z}$, $k_z = k \sqrt{\sin^2 \Theta + \cos^2 \Theta \frac{f_H^2 - f^2}{f_0^2 - f^2}}$ и при $f \rightarrow f_0$ имеет поверхностный характер.

С учетом выражений для плотности состояний в спектре (2) подтверждением корреляции зависимостей $V(f)$ и $\rho(f)$ будет обнаружение в зависимости $V(f)$ при накачке ООМСВ максимума только вблизи f_0 , а в случае ПМСВ – двух максимумов на частотах f_0 и f_s . Реализация такого подхода возможна при выполнении ряда требований как к параметрам пленок YIG, так и к параметрам эксперимента. Во-первых, чтобы получить в пленках YIG зависимости $\rho(f)$ вида (2) необходимо минимизировать влияние неоднородного обмена на спектр дипольных МСВ [39–41]. Для этого между толщиной d пленок YIG и длиной свободного пробега обменной СВ l^{ex} [39] должно выполняться соотношение $2d > l^{\text{ex}}$, когда отсутствует многократный пробег СВ по толщине, приводящий к квантованию спектра обменных СВ и формированию дипольно-обменных резонансов [40, 41]. Для типичных эпитаксиальных пленок YIG со скоростью релаксации СВ $\epsilon = 3 \cdot 10^{-4}$ [1–6] условие $2d > l^{\text{ex}}$ выполняется при толщине $d \geq 8$ мкм [41, 42]. Важно отметить, что в толстых пленках YIG неоднородный обмен разрушает поверхностный характер и приводит к радиационным потерям ПМСВ [43, 44], которые при $k \geq 10^6 \text{ см}^{-1}$ делают время жизни ПМСВ на частоте f_s меньше периода волны [43].

Во-вторых, необходимо обеспечить возбуждение ПМСВ во всей полосе частот $[f_0, f_s]$, что реализуется при использовании полосковых микроантенн (МА) СВ шириной w меньше толщины d пленки YIG ($w < d$) [39]. Наконец, низкая вольт-ваттная чувствительность структур YIG/Pt ($< 10^{-2} \text{ В/Вт}$) [15, 19] вынуждает проводить эксперименты при значениях $H > 2\pi M = 875 \text{ Э}$, когда трехмагнонные процессы распада запрещены для ПМСВ во всем диапазоне частот $[f_0, f_s]$ и не могут ограничивать мощность ПМСВ [45, 46]. Поэтому в работе рассмотрены результаты, полученные при $H = 939 \text{ Э}$.

В наших экспериментах исследовалась спиновая накачка ПМСВ и ООМСВ в структурах на основе пластин размером 15×15 мм из пленок YIG, эпитаксиально выращенных на подложках гадолиний-галлиевого граната (GGG). На поверхности пластин методами магнетронного распыления, фотолитографии и ионного травления были сформированы пары полосковых МА с пленками Pt между ними, см. рис. 1. Каждый образец содержал набор структур YIG/Pt-МА с расстоянием между МА от 230 до 830 мкм и пленками Pt толщиной 4–10 нм, шириной 200 мкм и длиной от 200 до 800 мкм. МА с контактными площадками (обозначены на рис. 1 римскими I и II) для подключения сверхвысокочастотных (СВЧ) микрозондов, а также контакты к Pt изготавливались на одном технологическом этапе из меди толщиной 0.5 мкм. МА имели длину $l = 250$ мкм и ширину $w = 4$ мкм, что позволяет возбуждать СВ с $k \leq k^* = \pi/w \approx 7.8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ [39].

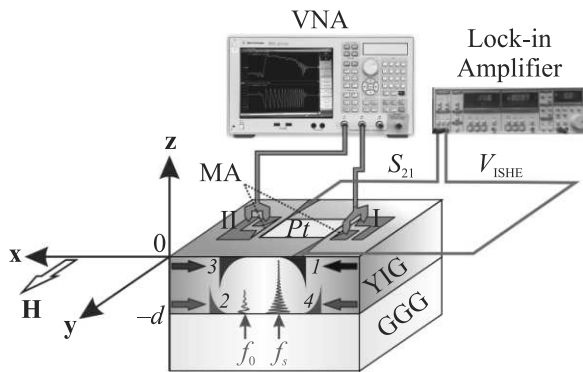


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента и структура YIG/Pt. Римскими I и II показаны полосковые микроантенны (МА) с контактными площадками для СВЧ-зондов. На вставке цветом показан характер распространения намагнитченности и направление распространения дипольного ПМСВ, отвечающий кривым 1–4 на рис. 3с. Стрелкой в направлении оси y показано направление магнитного поля $\mathbf{H}$ в геометрии ПМСВ, тогда как для геометрии ООМСВ поле $\mathbf{H}$ ориентируется вдоль оси x

Образцы помещались в зазор электромагнита так, что касательное магнитное поле $\mathbf{H}$ было направлено вдоль или перпендикулярно МА, что отвечало, соответственно, возбуждению ПМСВ ($\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$) или ООМСВ ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$). Характеристики МСВ измерялись с помощью векторного анализатора цепей. Измерялись спектры передачи $S_{12}(f)$, коэффициент преобразования $K(f)$ падающей мощности P_{in} в мощность МСВ P и закон дисперсии $k = k(f)$. Частотные зависимости ЭДС $V(f)$ измерялись в режиме модуляции

падающей СВЧ-мощности P_{in} с частотой 11 кГц. Зависимости $V(f)$ сопоставлялись как с результатами расчета $\rho_{v,s}(f)$, так и с результатами измерений зависимостей $S_{12}(f)$, $k = k(f)$ и $K(f)$, поскольку мощность P [14–23] и волновое число k [14, 19, 25] СВ могут оказывать влияние на величину и характер частотной зависимости ЭДС.

Большинство экспериментов выполнено со структурами на основе пленок YIG, выращенных на подложках GGG с кристаллографической ориентацией (111) и толщиной $d = 8.8; 11; 14; 20$ и 41 мкм. Для выяснения влияния кристаллографической анизотропии YIG на характер зависимости $V(f)$ также была использована пленка $d = 16$ мкм, выращенная на подложке GGG с кристаллографической ориентацией (100). Оказалось, что для рассмотренных структур YIG/Pt ни выбор кристаллографической ориентации подложки, ни изменение толщины YIG не вносят принципиальных изменений в характер зависимостей $V(f)$. Ниже рассматриваются результаты для структур YIG(8.8 мкм)/Pt(8 нм)/GGG(111) и YIG(8.8 мкм)/Pt(4 нм)/GGG(111) с расстоянием L между МА $L = 230$ мкм.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение. На рисунках 2 и 3 для случаев ООМСВ и ПМСВ, соответственно, приведены результаты измерений частотных зависимостей $V(f)$, $S_{12}(f)$, $k = k(f)$ и $K(f)$ в структурах. Измерение ЭДС проводилось при $P_{\text{in}} = -5$ дБм. Зависимости $S_{12}(f)$, $k = k(f)$ и $K(f)$ получены при $P_{\text{in}} = -20$ дБм. Кривые 1 и 2 отвечают результатам измерений при возбуждении МСВ антенной I при направлении магнитного поля $\mathbf{H}$ и $-\mathbf{H}$, соответственно. При этом считается, что для случая ООМСВ (рис. 2) направление $\mathbf{H}$ совпадает с направлением оси x (см. рис. 1), а для случая ПМСВ (рис. 3) поле $\mathbf{H}$ направлено по оси y (см. рис. 1). Кривыми 3 и 4 на рис. 3с показаны зависимости $V(f)$ при возбуждении ПМСВ антенной II и при магнитном поле направленном, соответственно, против ($-\mathbf{H}$) и по ($\mathbf{H}$) направлению оси y . Вертикальными пунктирными линиями на рис. 2 и 3 показано положение частот $f_H = 2.63$ ГГц, $f_0 = 4.45$ ГГц и $f_s = 5.11$ ГГц, отвечающие границам спектра дипольных ООМСВ и ПМСВ при $H = 939$ Э, $\gamma = 2.8$ МГц/Э и эффективной намагнитченности YIG $4\pi M^{\text{ef}} = 1785$ Гс.

3.1. Геометрия ООМСВ. Из рисунков 2а и б можно видеть, что в структуре наблюдается распространение ООМСВ в полосе частот 2.9–4.45 ГГц, которая определяется диапазоном волновых чисел $k \leq k^*$, возбуждаемых МА, и достаточно близка к теоретической оценке интервала частот ООМСВ $[f_H, f_0]$.

Эффективность возбуждения достигает максимальных значений $K(f) \approx 0.23$ при $f \approx f_0$, что с учетом двунаправленности возбуждения ООМСВ отвечает при $P_{in} = -5$ дБм мощности ООМСВ накачки $P(f_0) = 0.5 \cdot P_{in} \cdot 0.23 \approx 32$ мкВт. С уменьшением частоты значения $K(f)$ снижаются и при отстройке частоты ООМСВ от f_0 на величину 300 МГц мощность ООМСВ падает на 50 % до значений $P \approx 16$ мкВт.

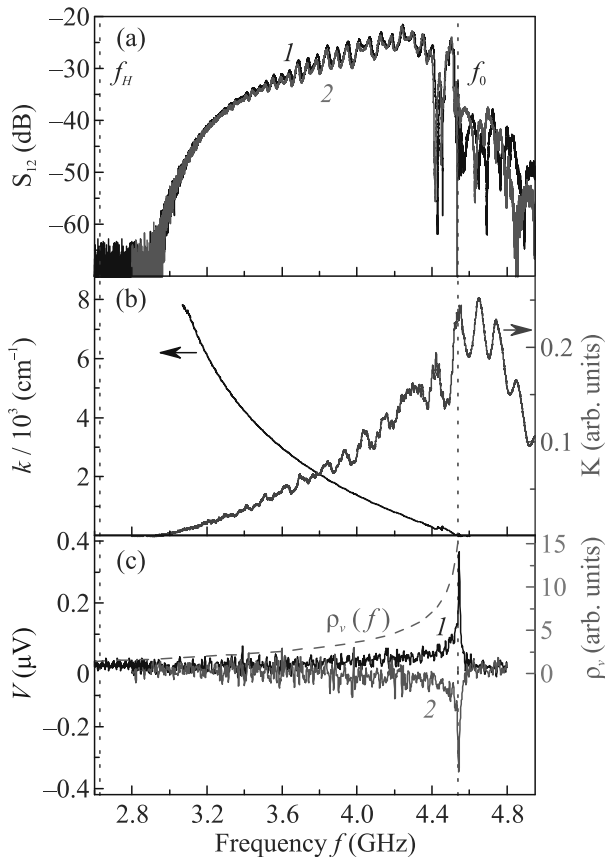


Рис. 2. (Цветной онлайн) Геометрия ООМСВ $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$, YIG(8.8 мкм)/Pt(4 нм)/GGG(111). Частотные зависимости: (а) – коэффициента передачи $S_{12}(f)$; (б) – волнового числа $k = k(f)$ и коэффициента преобразования $K(f)$ падающей мощности P_{in} в мощность ООМСВ $K(f)$; (с) – $V(f)$ для $P_{in} = -5$ дБм – сплошная линия и DOS $\rho_v(f)$, рассчитанная по формуле (2), – пунктирная линия. Кривые 1 и 2 соответствуют направлениям магнитного поля вдоль и против оси x на рис. 1

Из рисунка 2с видно, что сигнал ЭДС достигает максимального значения $V(f) \approx 366$ нВ вблизи частоты f_0 и спадает с понижением частоты до уровня шумового (~ 10 нВ) при отстройке от f_0 на величину ~ 300 МГц. В целом, из результатов измерений, представленных на рис. 2, следует, что характер частотной зависимости $V(f)$ не определяется мощностью или законом дисперсии распространяющихся в

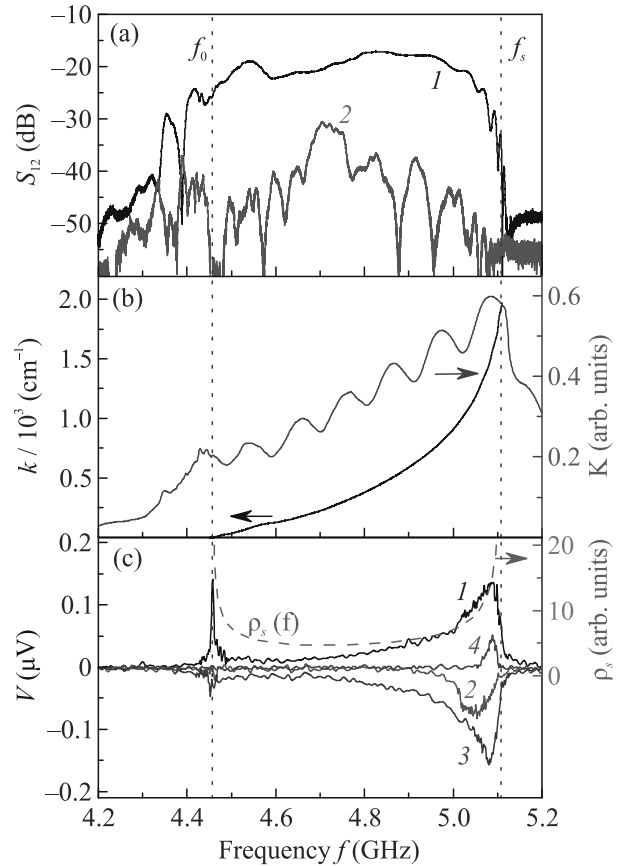


Рис. 3. (Цветной онлайн) Геометрия ПМСВ $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$, YIG(8.8 мкм)/Pt(8 нм)/GGG(111). Частотные зависимости: (а) – коэффициента передачи $S_{12}(f)$ для ПМСВ, распространяющейся по границам YIG/Pt (1) и YIG/GGG (2); (б) – волнового числа $k = k(f)$ и коэффициента $K(f)$ преобразования падающей мощности P_{in} в мощность ПМСВ; (с) – сплошные линии 1–4 $V(f)$ при $P_{in} = -5$ дБм, где кривые 1, 3 и 2, 4 получены при накачке ПМСВ, распространяющимися вдоль границ YIG/Pt и YIG/GGG соответственно, см. вставку к рис. 1. Штриховая линия расчет $\rho_s(f)$ по формуле (2). Вертикальные пунктирные линии показывают положение длинноволновой (f_0) и коротковолновой (f_s) границ спектра ПМСВ

структуре ООМСВ. С другой стороны, наличие максимума ЭДС на частоте сингулярности ван Хова f_0 и характер зависимости $V(f)$ согласуются с расчетом по формуле (2) зависимости $\rho_v(f)$, которая показана на рис. 2с штриховой линией. Следует отметить, что смена направления магнитного поля не меняет условия распространения ООМСВ, но приводит к смене знака $V(f)$ в соответствии с механизмом ISHE, см. кривые 1 и 2 на рис. 2а и с.

3.2. Геометрия ПМСВ. Результаты измерения зависимостей $S_{12}(f)$, $k = k(f)$, $K(f)$ и $V(f)$ при распространении ПМСВ в структуре приведены на

рис. 3. Можно видеть, что интервал частот, в котором наблюдается распространение ПМСВ соответствует теоретическому $[f_0, f_s]$. Распространение ПМСВ в структуре характеризуется невязимостью выше 10 дБ по всей полосе частот, что можно видеть из сравнения характеристик $S_{12}(f)$ при направлениях поля $\mathbf{H}$ и $-\mathbf{H}$, см. кривые 1 и 2 на рис. 3а. В этом случае зависимость $K(f)$ на рис. 3б с точностью не хуже 10 % характеризует преобразование P_{in} в мощность ПМСВ “прижатой” к поверхности YIG/Pt и демонстрирует рост значений от $K(f) \approx 0.2$ при $f \approx f_0$ до $K(f) \approx 0.6$ при $f \approx f_s$. Измеренная зависимость $k = k(f)$ на рис. 3б отвечает закону дисперсии ПМСВ с $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$ [38]: $f^2 = f_s^2 - \frac{f_m^2}{4} e^{-2kd}$. Максимальному измеренному значению $k_{\text{max}} \approx 3290 \text{ см}^{-1}$ отвечает частота ПМСВ f , отстоящая от частоты f_s на $\delta f = f_s - f < 2 \text{ МГц}$. Из рисунка 3с видно, что зависимость $V(f)$ имеет максимумы вблизи частот f_0 и f_s , которые при $P_{\text{in}} = -5 \text{ дБм}$ составляют $V(f_0, f_s) \approx 140 \text{ нВ}$. Такое поведение $V(f)$ нельзя объяснить частотной зависимостью коэффициента $K(f)$, поскольку $K(f)$ не имеет особенностей на частотах $f \approx f_0$. Пунктирной кривой на рис. 3с показан расчет зависимости $\rho_s(f)$. Видно, что частоты $f_{0,s}$, на которых наблюдаются максимумы ЭДС, соответствуют частотам сингулярностей ван Хова в плотности состояний $\rho_s(f)$ в спектре дипольных ПМСВ. Поэтому следует предположить, что рост значений $V(f)$ на частотах f_0 и f_s отражает рост эффективности электрон-магнонного рассеяния на интерфейсе YIG/Pt.

Отметим, что в нашем случае из-за сильной невязимости распространения ПМСВ смена направления поля $\mathbf{H}$ или распространения волны (волнового вектора $\mathbf{k}$) оказывает заметное влияние на вид зависимости $V(f)$, см. кривые 1–4 на рис. 3с. Кривые 1 и 2 отвечают направлению $\mathbf{H}$, показанному стрелкой на рис. 1, а кривые 3 и 4 – направлению $-\mathbf{H}$. Кривые 1(3) получены, когда в качестве входной взята антенна I(II) и ПМСВ распространяется вдоль границы YIG/Pt, см. вставку к рис. 1. Кривые 2(4) отвечают случаю, когда антенна II(I) является входной и ПМСВ распространяется вдоль границы YIG/GGG. Из результатов, представленных на рис. 3с, следует, что знак генерируемой ЭДС в соответствии с механизмом ISHE определяется направлением $\mathbf{H}$, а изменение направления $\mathbf{k}$ влияет лишь на величину ЭДС из-за невязимости распространения ПМСВ. Отметим, что заметная разница значений $V(f \approx f_0)$ для кривых 1 и 3 может быть связана как с различием параметров антенн I и II, так и с неоднородностью поля $\mathbf{H}$ в зазоре электромагнита зондовой станции

и распределения магнитных параметров в плоскости структуры.

Из рисунков 2с и 3с можно видеть, что частоты, на которых зависимости $V(f)$ достигают максимальных значений, коррелируют с частотами сингулярностей в зависимостях $\rho_v(f)$ и $\rho_s(f)$. Однако результаты измерения ЭДС для случая ПМСВ требуют дополнительного обсуждения с точки зрения влияния эффектов гибридизации дипольной ПМСВ с обменными волнами и особенностей распространения ПМСВ на частотах $f \rightarrow f_s$. Действительно, реализовать спиновую накачку бегущими ПМСВ при $f \rightarrow f_s$ становится проблематично из-за экспоненциального роста пространственного декремента ПМСВ $k'' = \text{Im } k = \epsilon\omega/V_g$, вызванного падением групповой скорости $V_g(f) = \pi f_m^2 d \cdot e^{-2k(f)d}/(2f) \rightarrow 0$. В рассматриваемой структуре это не позволяет на выходной МА выделить из шумов сигнал, отвечающий ПМСВ с волновыми числами $k_{\text{max}} < k \leq k^*$. Кроме того, падение V_g сопровождается ростом амплитуды намагниченности ПМСВ $|\mathbf{m}|^2 \sim P/(V_g dl)$, что может приводить к развитию четырехмагнонных (4М) параметрических процессов [45, 46]. На рисунке 4а приведены результаты измерений $V(f)$ при различных уровнях P_{in} . На рисунке 4б для частот $f_0, f_1 = 4.92, f_2 = 5.05$ и $f_3 = 5.09 \text{ ГГц}$, положение которых показано пунктирными линиями на рис. 4а, приведены зависимости $V(f_i, P_{\text{in}})$, $i = 0, 1, 2, 3$. Можно видеть, что для частоты f_3 зависимость $V(P_{\text{in}})$ имеет нелинейный вид, отвечающий поведению мощности ПМСВ за порогом 4М неустойчивости [45].

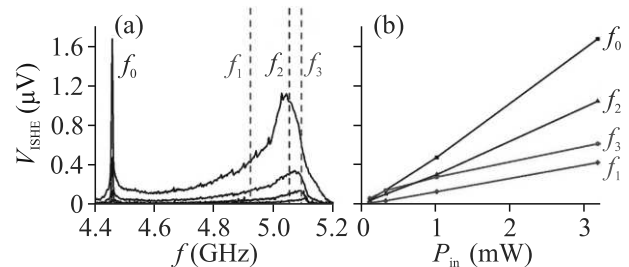


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $V(f)$ при уровнях падающей мощности $P_{\text{in}} = -10; -5; 0; 5 \text{ дБм}$. (б) – Зависимости $V(f_i, P_{\text{in}})$, $i = 0, 1, 2, 3$, положение частот $f_{1,2,3}$, отмечено на рис. (а) пунктиром, $f_1 = 4.92, f_2 = 5.05$ и $f_3 = 5.09 \text{ ГГц}$

Более быстрый рост с частотой $V(f)$ по сравнению с $\rho_s(f)$ на частотах $f_0 < f < f_s$ на рис. 3с может объясняться гибридизацией дипольной ПМСВ с обменными волнами. Действительно, закон дисперсии СВ имеет вид [39–44] $f^2 = \tilde{f}_H^2 + \tilde{f}_H f_m$, где $\tilde{f}_H = f_H + f_{\text{ex}}$, $f_{\text{ex}} = f_m \alpha Q^2$, $\alpha = 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$ – обменная константа в YIG, $Q^2 = k^2 + k_{\perp}^2$, $k_{\perp}$ – про-

екция волнового числа Q на нормаль к пленке. Проекция групповой скорости СВ $\mathbf{v}_g = 2\pi \nabla_Q f$ на плоскость $v_g^{\parallel}(f)$ и нормаль $v_g^{\perp}(f)$ пленки можно записать в виде $v_g^{\parallel}(f) = 4\pi\alpha k f_m \beta$ и $v_g^{\perp}(f) = 4\pi\alpha k_{\perp} f_m \beta$, где $\beta = (\tilde{f}_{\text{ex}} + f_s)/f \sim 1$. При $k \rightarrow 0$ компонента $v_g^{\parallel}(f) \rightarrow 0$, что характерно для областей дисперсии с высокой DOS [37]. Эффективность гибридизации ПМСВ и обменных СВ $\sim \alpha k^2$ и увеличивается с ростом k [40–44]. При этом эффективность рассеяния электронов на таких дипольно-обменных ПМСВ на частотах $f_0 < f < f_s$ возрастает за счет гибридизации дипольной ПМСВ с обменными волнами, имеющими высокую DOS.

Еще одной особенностью геометрии ПМСВ является сильная непропорциональность изменения значений $V(f_0)$ и $V(f_s)$ при изменении направления $\mathbf{H}$, что можно видеть из сравнения $V(f_0)$ и $V(f_s)$ для кривых 1 и 2 (3 и 4) на рис. 3с. Мы полагаем, что эта особенность может объясняться возбуждением обменных СВ как за счет отмеченных выше эффектов гибридизации, так и за счет 4М параметрических процессов [45, 46] на частоте $f \approx f_s$. Действительно, при $f \approx f_0$ для обменных СВ справедливы следующие оценки: $k_{\perp} = \pi/d \approx 4 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$, $v_g^{\perp}(f_0) < 7 \cdot 10^2 \text{ см/с}$, $d \gg l^{\text{ex}}(f_0) = v_g^{\perp}(f_0)/(2\pi f_0 \epsilon) \leq 1 \text{ мкм}$. При $f \approx f_s = 5.09 \text{ ГГц}$ $k_{\perp} \approx 50\pi/d \approx 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $v_g^{\perp}(f_s) > 10^4 \text{ см/с}$ и $l^{\text{ex}} \approx 9 \text{ мкм} \sim d$. На вставке к рис. 1 две красные осциллирующие кривые иллюстрируют разницу в длинах свободного пробега обменных СВ на частотах $f \approx f_0$ и $f \approx f_s$. Поэтому СВ, характеризующиеся высокой DOS, на частотах $f \approx f_s$ способны добежать до границы YIG/Pt и принять участие в процессах электрон-магнонного рассеяния.

Проведенное выше сопоставление экспериментальных зависимостей $V(f)$ и рассчитанных с помощью (2) $\rho(f)$ не учитывает влияние магнитной анизотропии и неоднородности распределения магнитных параметров пленки YIG. Неоднородность эффективной намагниченности $4\pi M^{\text{ef}}$ по толщине пленки может существенно влиять на гибридизацию дипольной и обменной волн и приводить к появлению в объеме пленки “точек поворота”, отвечающих местам эффективной генерации СВ полем ПМСВ [47, 48]. Магнитная анизотропия в пленках YIG может приводить к появлению в спектре пленки в окрестности f_0 анизотропных объемных магнитостатических волн (АОМСВ) [49–51]. В спектре таких АОМСВ обменное взаимодействие может формировать области дисперсии, где $v_g(f) \rightarrow 0$ [50] и возникает сингулярность в DOS.

4. Заключение. Таким образом, на примере спиновой накачки бегущими МСВ в структурах YIG/Pt показана связь между эффективностью транспорта спинового тока через интерфейс и сингулярностями ван Хова в плотности состояний в спектре спиновых волн структуры. С помощью обратного спинового эффекта Холла показано, что на частотах сингулярностей ван Хова наблюдается рост спиновой проводимости интерфейса YIG/Pt, обусловленный увеличением эффективности электрон-магнонного рассеяния. Следует отметить, что на частотах сингулярностей ван Хова одновременно с плотностью состояний увеличивается эффективная масса магнонов [52], что способствует процессу рассеяния электронов [53]. Полученные результаты открывают новый подход к созданию спинтронных структур с эффективной накачкой спинового тока бегущими СВ через управление спектром СВ. Действительно, помимо частот f_0 и f_s в спектре СВ, сингулярности ван Хова могут формироваться на частотах f^* различных резонансных взаимодействий, приводящих к образованию дополнительных участков с $v_g(f^*) \rightarrow 0$ в законе дисперсии. Примером таких частот f^* могут быть частоты брэгговских резонансов [54], а также дипольно-обменных резонансов в одиночных [39–41] и обменно-связанных [55] пленках YIG. Кроме того, полученные результаты могут быть полезны для разработки структур спинтроники, в которых эффективный спиновый транспорт осуществляется СВ с необходимой частотой и длиной волны, что важно для миниатюризации устройств. Отметим также, что высокая чувствительность электрон-магнонного рассеяния к сингулярностям в плотности состояний аналогична фотон-магнонному рассеянию в методе спектроскопии Мандельштама–Бриллюэна [53, 56]. Однако механизм возникновения ЭДС связан со спин-волновыми возбуждениями, имеющими высокую плотность состояний на поверхности, тогда как интенсивность светорассеяния имеет интегральную характеристику по объему пленки. Кроме того, на спиновую проводимость интерфейса YIG/Pt влияют только те сингулярности в плотности состояний, для которых амплитуда намагниченности на интерфейсе достаточно велика. В случае, когда на частоте сингулярности ван Хова СВ локализованы в объеме пленки YIG, их вклад в спиновую проводимость интерфейса будет мал. Примером такой сингулярности может быть частота “дна” f_H в законе дисперсии основной моды ООМСВ, для которой на границах пленки амплитуда намагниченности $|\mathbf{m}| = 0$ [38] и в экспериментах по спиновой накачке параметрическими спиновыми волнами заселение “дна” спек-

тра не сопровождается резонансным ростом сигнала ЭДС [14].

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту 22-19-00500. Работа С. А. Никитова выполнялась в рамках государственного задания “Спинтроника”. Работа А. Хитуна частично поддержана Национальным научным фондом по гранту 2006290, Руководитель программы Доктор С. Басу и корпорацией Интел по гранту 008635 (Спин-волновой компьютеринг), Руководитель проекта – Доктор Д. Е. Никонов.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. A. A. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *Nat. Phys.* **11**, 453 (2015).
2. V. E. Demidov, S. Urazhdin, G. de Loubens, O. Klein, V. Cros, A. Anane, and S. O. Demokritov, *Phys. Rep.* **673**, 23 (2017).
3. M. Althammer, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 313001 (2018).
4. V. E. Demidov, S. Urazhdin, A. Anane, V. Cros, and S. O. Demokritov, *J. Appl. Phys.* **127**, 170901 (2020).
5. A. Brataas, B. van Wees, O. Klein, G. de Loubens, and M. Viret, *Phys. Rep.* **885**, 1 (2020).
6. С. А. Никитов, А. Р. Сафин, Д. В. Калябин, А. В. Садовников, Е. Н. Бегинин, М. В. Логунов, М. А. Морозова, С. А. Одинцов, С. А. Осокин, А. Ю. Шараевская, Ю. П. Шараевский, А. И. Кирилюк, *УФН* **190**, 1009 (2020).
7. J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).
8. Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nature* **464**, 262 (2010).
9. M. Collet, X. de Milly, O. d’Allivy Kelly, V. V. Naletov, R. Bernard, P. Bortolotti, J. Ben Youssef, V. E. Demidov, S. O. Demokritov, J. L. Prieto, M. Muñoz, V. Cros, A. Anane, G. de Loubens, and O. Klein, *Nat. Commun.* **7**, 10377 (2016).
10. Z. Wang, Y. Sun, M. Wu, V. Tiberkevich, and A. Slavin, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 146602 (2011).
11. E. Padrón-Hernández, A. Azevedo, and S. M. Rezende, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 192511 (2011).
12. M. Evelt, V. E. Demidov, V. Bessonov, S. O. Demokritov, J. L. Prieto, M. Muñoz, J. Ben Youssef, V. V. Naletov, G. de Loubens, O. Klein, M. Collet, K. Garcia-Hernandez, P. Bortolotti, V. Cros, and A. Anane, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 172406 (2016).
13. K.-I. Uchida, H. Adachi, T. Ota, H. Nakayama, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 172505 (2010).
14. C. W. Sandweg, Y. Kajiwara, A. V. Chumak, A. A. Serga, V. I. Vasyuchka, M. B. Jungfleisch, E. Saitoh, and B. Hillebrands, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 216601 (2011).
15. H. Kurebayashi, O. Dzyapko, V. E. Demidov, D. Fang, A. J. Ferguson, and S. O. Demokritov, *Nat. Mater.* **10**, 660 (2011).
16. H. Kurebayashi, O. Dzyapko, V. E. Demidov, D. Fang, A. J. Ferguson, and S. O. Demokritov, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 162502 (2011).
17. T. B. Noack, V. I. Vasyuchka, D. A. Bozhko, B. Heinz, P. Frey, B. Hillebrands, and A. A. Serga, *Phys. Status Solidi B* **256**, 1900121 (2019).
18. M. Agrawal, A. A. Serga, V. Lauer, E. Th. Papaioannou, B. Hillebrands, and V. I. Vasyuchka, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 092404 (2014).
19. C. W. Sandweg, Y. Kajiwara, K. Ando, E. Saitoh, and B. Hillebrands, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 252504 (2010).
20. V. Castel, N. Vlietstra, J. Ben Youssef, and B. J. van Wees, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 132414 (2012).
21. V. Castel, N. Vlietstra, B. J. van Wees, and J. Ben Youssef, *Phys. Rev. B* **86**, 134419 (2012).
22. M. B. Jungfleisch, A. V. Chumak, A. Kehlberger, V. Lauer, D. H. Kim, M. C. Onbasli, C. A. Ross, M. Klau, and B. Hillebrands, *Phys. Rev. B*, **91**, 134407 (2015).
23. A. V. Chumak, A. A. Serga, M. B. Jungfleisch, R. Neb, D. A. Bozhko, V. S. Tiberkevich, and B. Hillebrands, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 082405 (2012).
24. O. d’Allivy Kelly, A. Anane, R. Bernard et al. (Collaboration), *Appl. Phys. Lett.* **103**, 082408 (2013).
25. M. Balinsky, M. Ranjbar, M. Haidar, P. Dürrenfeld, R. K. Dumas, S. Khartsev, A. Slavin, and J. Åkerman, *IEEE Magn. Lett.* **6**, 3000604 (2015).
26. M. Balinsky, H. Chiang, D. Gutierrez, and A. Khitun, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 242402 (2021).
27. Y. Tserkovnyak, A. Brataas, and G. E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 117601 (2002).
28. Z. Qiu, K. Ando, K. Uchida, Y. Kajiwara, R. Takahashi, H. Nakayama, T. An, Y. Fujikawa, and E. Saitoh, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 092404 (2013).
29. Y. Saiga, K. Mizunuma, Y. Kono, J. C. Ryu, H. Ono, M. Kohda, and E. Okuno, *Appl. Phys. Express* **7**, 093001 (2014).
30. L. Liu, Y. Li, Y. Liu, T. Feng, J. Xu, X. R. Wang, D. Wu, P. Gao, and J. Li, *Phys. Rev. B* **102**, 014411 (2020).
31. D. Song, L. Ma, S. Zhou, and J. Zhu, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 042401 (2015).
32. M. B. Jungfleisch, V. Lauer, R. Neb, A. V. Chumak, and B. Hillebrands, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 022411 (2013).
33. Y. Sun, H. Chang, M. Kabatek, Y.-Y. Song, Z. Wang, M. Jantz, W. Schneider, M. Wu, E. Montoya, B. Kardasz, B. Heinrich, S. G. E. te Velthuis, H. Schultheiss, and A. Hoffmann, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 106601 (2013).
34. A. Aqeel, I. J. Vera-Marun, B. J. van Wees, and T. T. M. Palstra, *J. Appl. Phys.* **116**, 153705 (2014).

35. S. Takahashi, E. Saitoh, and S. Maekawa, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 062030 (2010).
36. E. G. Tveten, A. Brataas, and Y. Tserkovnyak, Phys. Rev. B **92**, 180412(R) (2015).
37. L. van Hove, Phys. Rev. **89**, 1189 (1953).
38. R. W. Damon and J. R. Eshbach, J. Phys. Chem. Solids, **19**, 308 (1961).
39. А. Г. Гуревич, Г. А. Мелков, *Магнитные колебания и волны*, Физматлит, М. (1994).
40. R. E. De Wames and T. Wolfram, J. Appl. Phys. **41**, 987 (1970).
41. Ю. В. Гуляев, А. С. Бугаев, П. Е. Зильберман, И. А. Игнатьев, А. Г. Коновалов, А. В. Луговской, А. М. Медников, Б. П. Нам, Е. И. Николаев, Письма в ЖЭТФ **30**, 565 (1979).
42. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, А. В. Луговской, ФТТ **23**, 660 (1981).
43. T. Wolfram and R. E. De Wames, Phys. Rev. B **1**, 4358 (1970).
44. Г. Т. Казаков, А. Г. Сухарев, Ю. А. Филимонов, ФТТ **32**, 3571 (1990).
45. Г. Т. Казаков, А. В. Кожевников, Ю. А. Филимонов, ФТТ **39**(2), 330 (1997).
46. Г. Т. Казаков, А. В. Кожевников, Ю. А. Филимонов, ЖЭТФ **115**(1), 318 (1999).
47. П. Е. Зильберман, А. Г. Темиряев, М. П. Тихомирова, УФН **165**, 1219 (1995).
48. В. К. Сахаров, Ю. В. Хивинцев, Г. М. Дудко, А. С. Джумалиев, С. Л. Высоцкий, А. И. Стогний, Ю. А. Филимонов, ФТТ **64**, 1255 (2022).
49. R. Gieniusz and L. Smoczyński, J. Magn. Magn. Mat. **66**, 366 (1987).
50. B. A. Kalinikos, M. P. Kostylev, N. V. Kozhus, and A. N. Slavin, J. Phys. Condens. Matter **2**, 9861 (1990).
51. П. Е. Зильберман, В. М. Куликов, В. В. Тихонов, И. В. Шеин, ЖЭТФ **72**, 874 (1991).
52. В. Г. Барьяхтар, А. Г. Квирикадзе, В. А. Попов, ЖЭТФ **59**, 898 (1970).
53. J. A. Reissland, *The Physics of Phonons*, John Wiley & Sons, N.Y. (1973).
54. С. Л. Высоцкий, С. А. Никитов, Ю. А. Филимонов, ЖЭТФ **101**, 547 (2005).
55. S. Vysotskii, A. Kozhevnikov, M. Balinskiy, A. Khitun, and Y. Filimonov, J. Appl. Phys. **132**, 084504 (2022).
56. R. E. Camley, T. S. Rahman, and D. L. Mills, Phys. Rev. B **27**, 261 (1983).

Теоретическое исследование влияния эпитаксиальной деформации на структурные и магнитные свойства тонкой пленки YFeO_3 на подложке SrTiO_3

Г. С. Дедов⁺¹⁾, А. О. Шориков^{*×+}

⁺Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия

^{*}Институт физики металлов, Уральское отделение РАН, 620108 Екатеринбург, Россия,

[×]Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 ноября 2023 г.

После переработки 29 марта 2024 г.

Принята к публикации 4 апреля 2024 г.

В рамках метода $\text{GGA} + U$ были исследованы электронная структура и магнитные свойства тонкой пленки YFeO_3 на подложке SrTiO_3 . Было показано, что в тонкой пленке $\text{YFeO}_3/\text{SrTiO}_3$ эпитаксиальная деформация приводит к существенным искажениям кристаллической структуры и смещению атомов железа на поверхности пленки из плоскости, образованной ближайшими кислородами. Данные искажения приводят к смене типа дальнего магнитного упорядочения от антиферромагнитного G-типа, наблюдаемого в стехиометрическом YFeO_3 , к ферримagnetному упорядочению, близкому к антиферромагнитному упорядочению A-типа, и переходу от диэлектрического состояния в металлическое. Полная релаксация позиций атомов привела к возникновению искажения типа “дыхательной моды” в толще пленки, которая сопровождается появлением электрической поляризации 15.1 мКл/см^2 , что находится в согласии с экспериментом. Искажение кислородных октаэдров вокруг атомов железа приводит к переходу из высокоспинового в промежуточнospиновое состояние и падению величин локальных моментов.

DOI: 10.31857/S1234567824090088, EDN: GJTRWR

Введение. Мультиферроики – материалы, которые обладают магнитным и сегнетоэлектрическим упорядочениями в одной и той же фазе, способными влиять друг на друга [1], интенсивно изучались в последние годы после открытия эффекта связи между параметрами магнитного и ферроэлектрического порядка [2–4]. Поиск новых материалов-мультиферроиков обусловлен возможностью их использования для изготовления электронных устройств с более совершенными функциями в области хранения информации, для создания высокочувствительных датчиков, а также в спинтронике [5]. В высокосимметричных соединениях со структурой перовскита ABO_3 редко наблюдается одновременно электрическая поляризация и дальний магнитный порядок в одной фазе. Исключением является BaTiO_3 , хорошо изученный однофазный мультиферроик, с богатой фазовой диаграммой, демонстрирующий большое значение электрической поляризации [6]. Однако магнитное упорядочение и электрическая поляризация наблюдались одновре-

менно в других соединениях со структурой перовскита [7], в которых она была связана с понижением симметрии и смещением катиона В вдоль одной из кристаллографических осей. Аналогичного эффекта можно добиться, используя многослойные пленочные материалы, в которых искажения кристаллической структуры могут возникать вследствие эпитаксиальной деформации [8], что открывает целый класс соединений – плёночных мультиферроиков [9]. Пленочные ферроэлектрики в настоящее время являются актуальными объектами исследования как в рамках экспериментальных методов, так и превопринципных подходов [10, 11]. Исследование мультиферроичных наноструктурированных пленок в последнее время ускорилось благодаря быстрому прогрессу в методах их выращивания [12]. Например, для одного из первых плёночных мультиферроиков YMnO_3 была исследована возможность выращивания моно и поликристаллов на подложках с различными составами и ориентациями поверхностей [13]. Эксперименты показывают, что пленочные материалы более склонны к проявлению электрической поляризации [14].

¹⁾e-mail: Grigory.Dedov@urfu.me

Итриевый ортоферрит YFeO_3 привлекает внимание своим уникальным сочетанием физических и химических свойств, и влияние допирования и методов обработки на его электрические и магнитные свойства в объемных образцах активно исследовались экспериментальными методами [15–18]. Для объемных монокристаллов YFeO_3 зарегистрирована самая высокая скорость доменных границ [19]. Наличие свойств мультиферроика у тонкопленочного YFeO_3 на подложке $\text{SrRuO}_3/\text{SrTiO}_3$ (100) было подтверждено ранее в эксперименте [20]. В толстых пленках YFeO_3 на подложке SrTiO_3 была обнаружена сильная магнитная анизотропия перпендикулярно плоскости интерфейса (001) [21].

С помощью методов ядерного-магнитного резонанса (ЯМР) для пленки YFeO_3 на подложке Al_2O_3 , отожженной в кислородной атмосфере, было показано возникновение существенной неоднородности локальных магнитных полей, что авторы интерпретовали как возникновение двух классов ионов железа с разной валентностью Fe^{2+} Fe^{3+} [22].

В данной работе с помощью первопринципных расчетов, выполненных в рамках приближения электронной плотности, были исследованы электронные и магнитные свойства для стехиометрического образца YFeO_3 . Для гетероструктуры, представляющей собой YFeO_3 , нанесенный тонкой пленкой на подложку SrTiO_3 (001), было исследовано влияние искажений кристаллической структуры, вызванное эпитаксиальной деформацией, на электронные и магнитные свойства YFeO_3 . Показано, что смещение атомов железа в поверхностном слое из плоскости FeO_2 приводит возникновению электрической поляризации, а искажения кристаллической структуры вызывают смену дальнего магнитного порядка, спинового состояния и степени окисления.

Метод. Расчеты зонной структуры $\varepsilon(\mathbf{k})$ были выполнены в рамках приближения электронной плотности (ТФП) с использованием функционала PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [23] для обменно-корреляционного потенциала. Учет кулоновских корреляций был выполнен в рамках метода GGA + U [24, 25]. Для учета экранировки кулоновского отталкивания электронами на оболочках атомов лигандов и особенностей кристаллической структуры параметр кулоновского взаимодействия на d -орбиталях атома железа был рассчитан в рамках метода линейного отклика [26]. В данной работе для всех рассмотренных структур были использованы параметры кулоновского отталкивания U и параметр Хунда J для d -орбиталей атома Fe, равными 4 и 1 эВ, соответственно. Все расче-

ты электронной структуры и релаксация позиций атомов были выполнены с помощью программного пакета Quantum Espresso [27], псевдопотенциалы были взяты из библиотеки стандартных псевдопотенциалов для твердых тел [28]. Метод GGA + U с полной релаксацией позиций атомов хорошо зарекомендовал себя и был использован ранее для исследования структурных и магнитных свойств кальциевого ортоферрита CaFeO_3 , где позволил получить описание фазового перехода под давлением в хорошем согласии с экспериментом [29], а также при исследовании магнитных свойств тонких пленок LaNiO_3 [30].

Результаты и их обсуждение.

Стехиометрический YFeO_3 . На первом этапе работы были проведены GGA + U расчеты электронной структуры для стехиометрического YFeO_3 для орторомбической фазы, параметры которой были взяты из работы [31]. Согласно экспериментальным данным чистый YFeO_3 является АФМ G-типа [32] с температурой Нееля $T_N = 644$ К [33]. В соединении YFeO_3 железо расположено в центрах кислородных октаэдров. Кристаллическое поле лигандов расщепляет 5-кратно вырожденный уровень d -уровень железа на 3-кратно вырожденный t_{2g} подуровень и 2-кратно вырожденный e_g подуровень, который расположен выше по энергии. В рамках данной работы были рассмотрены А-, С- и G-типы антиферромагнитного (АФМ) и ферромагнитного (ФМ) упорядочения. В таблице 1 приведены полученные в расчетах значения полной энергии на формульную единицу, ширина запрещенной зоны, значение магнитного момента на атоме Fe.

Таблица 1. Полная энергия, ширина запрещенной щели, магнитный момент на узле Fe и его отношение к максимальному моменту S_0 , полученные в GGA + U расчете для стехиометрического YFeO_3 для разных типов дальнего магнитного порядка

Тип АФМ	А-тип	С-тип	G-тип	F-тип
$E/\text{f.u.}$, эВ	0.236	0.108	0	0.378
ΔE , эВ	0.2	1	1.8	3.5
$\mu/\text{атом}$, μ_B	3.68	3.63	3.60	3.74
S/S_0	0.74	0.73	0.72	0.75

Согласно результатам расчета G-тип имеет наименьшую энергию и является наиболее стабильной конфигурацией для стехиометрического соединения YFeO_3 , что полностью согласуется с экспериментом [32]. Однако расчетное значение ширины запрещенной зоны 1.80 эВ меньше экспериментального значения 2.57 эВ [34]. Такая недооценка $\approx 30\%$ может быть связана с малой величиной использован-

ного параметра кулоновского отталкивания U . Хотя величина U была вычислена в рамках приближения линейного отклика [26], невысокая точность метода привела к недооценке данного параметра, и лучшего согласия с экспериментально измеренной величиной щели можно добиться путем варьирования параметра U .

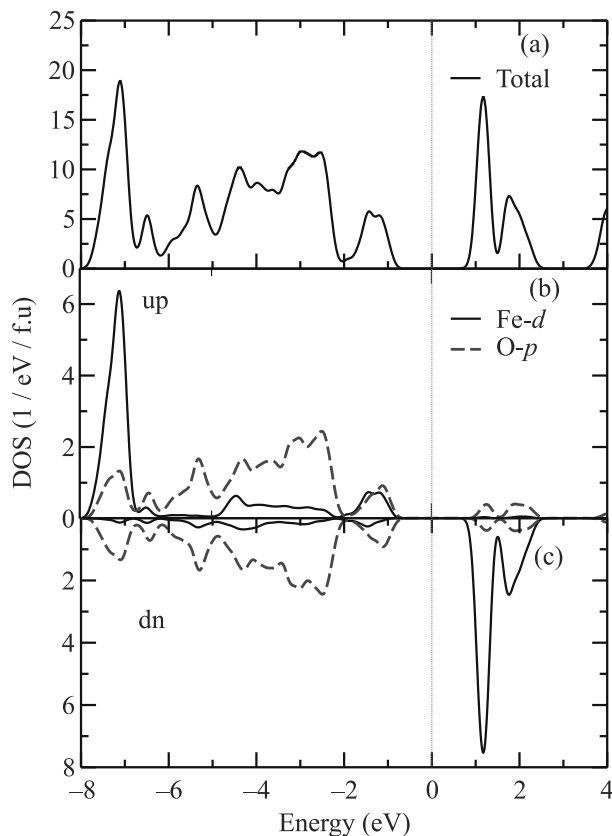


Рис.1. (Цветной онлайн) Плотность состояний для АФМ G-типа в стехиометрическом YFeO_3 . На верхней панели полная плотность состояний, на панелях (b) и (c) – парциальные плотности состояний Fe- d (черные сплошные линии), и O- p (зеленые пунктирные линии) для спинов вверх и вниз, соответственно

В соединении YFeO_3 железо имеет степень окисления Fe^{3+} и электронную конфигурацию d^5 , которой в случае высокоспинового состояния соответствует максимальное теоретическое значение магнитного момента $S_0 = 5.0\mu_B$. Вследствие сильной гибридизации p -орбиталей кислорода с d -орбиталями железа заселенности орбиталей отличаются от атомных значений, для формально незанятых орбиталей их заселенность больше 0. Поскольку величина локального магнитного момента определяется как разность заселенностей зон железа со спином вверх и вниз, $n(\uparrow) - n(\downarrow)$, рассчитанные величины локаль-

ного магнитного момента меньше S_0 . Рассчитанное значение S/S_0 для G-типа АМФ порядка находится в хорошем согласии с экспериментальным значением 0.868 [35]. Спиновая конфигурация какой-либо оболочки может быть определена из матриц заселенности, полученных в DFT расчете. Для этого матрицы необходимо диагонализировать и рассмотреть их собственные значения. Орбитали, для которых собственные значения близки к 1 рассматриваются как занятые, орбитали, для которых собственные значения меньше 0.5 – пустые. В стехиометрическом YFeO_3 для G-типа АФМ порядка собственные значения матрицы заселенности для спина вверх равны: 0.98, 0.99, 0.99, 0.99, 0.99 и для спина вниз – 0.14, 0.15, 0.16, 0.45, 0.45, что соответствует высокоспиновой конфигурации $t_{2g}(\uparrow)^3 e_g(\uparrow)^2$, $t_{2g}(\downarrow)^0 e_g(\downarrow)^0$. Для больших собственных значения, 0.45 являются следствием сильной гибридизации e_g орбиталей железа и p -орбиталей кислорода и данная конфигурация может быть записана как $d^5\bar{L}^2$. Для остальных типов АФМ и ФМ упорядочений также было получено высокоспиновое состояние ионов железа.

На рисунке 1 приведены графики плотности электронных состояний (DOS) для G-типа АФМ. Из приведенных графиков можно сказать, что в стехиометрическом YFeO_3 зоны O- p Fe- d лежат в пределах от -8 до 3 эВ, и сам он является изолятором. Потолок валентной зоны сформирован кислородными p - и железными d -состояниями, сильно гибридизованными между собой.

Тонкая пленка YFeO_3 на подложке SrTiO_3 . Для моделирования тонкой пленки YFeO_3 на подложке SrTiO_3 была сконструирована сверхячейка, состоящая из 4 слоев SrTiO_3 , а над подложкой были помещены два слоя YFeO_3 . Из верхнего слоя YFeO_3 были удалены атомы Y и вершинный кислород, так что поверхность пленки образована слоем FeO_2 . Над плоскостью FeO_2 был добавлен слой вакуума толщиной $23.4 \text{ \AA}$ (см. рис. 2). При релаксации кристаллической структуры размер и форма элементарной ячейки, и позиции атомов двух нижних слоев подложки SrTiO_3 оставались фиксированными. Для атомов, входящих в оставшиеся слои подложки и атомов тонкой пленки YFeO_3 была выполнена полная релаксация атомных позиций.

В отличие от стехиометрического YFeO_3 , в котором все атомы железа имеют одинаковое окружение, в тонкой пленке атомы железа становятся неэквивалентны: в нижнем слое Fe находится в центре кислородного октаэдра так же, как в стехиометрическом YFeO_3 , а в верхнем слое железо располагается в основании 4-х гранной пирамидки FeO_5 . В рассмотрен-

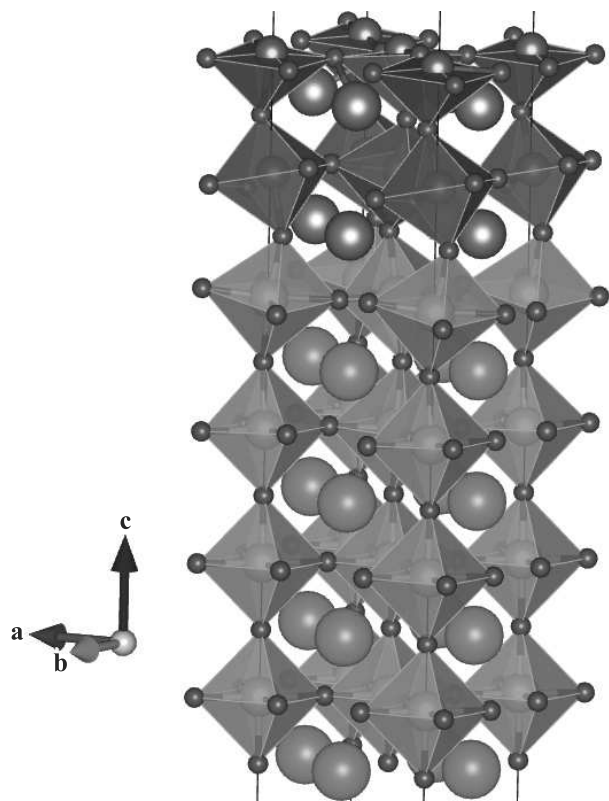


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сверхъячейка YFeO_3 на подложке SrTiO_3 после релаксации. Красные шары обозначают атомы O, зеленые – Sr, серые – Y, голубые – Ti, коричневые – Fe

ной ячейке имеется 4 неэквивалентных атома железа, два в нижнем слое, и два в плоскости FeO_2 . В результате релаксации кристаллической структуры возникают дополнительные искажения и смещения атомов и симметрия ячейки понижается. Вследствие этого возникает сложное ферримагнитное упорядочение, близкое к А-типу АФМ порядка. На рисунках 3 и 4 приведены графики плотности электронных состояний (DOS) для низшего по энергии типа дальнего магнитного порядка. Величины магнитных моментов и соответствующие изменения кристаллической структуры приведены в табл. 2. В ходе релаксации кристаллической структуры атомы железа в верхнем слое смещаются из верхней плоскости FeO_2 на 0.12 и 0.13 Å и становятся неэквивалентны, а их локальные моменты становятся равны $3.1\mu_B$ и $2.8\mu_B$, соответственно. Атомы кислорода также смещаются, что соответствует наклону и повороту пирамидок FeO_5 на 16° и 19° повороту на 1.6° и 1.2° . В нижнем слое объемы кислородных октаэдров становятся различными (9.6 и 10.1 Å^3), и возникает искажение по типу “дыхательной моды”. Атомы железа в центрах октаэдров так же становятся неэквивалентными, а их

локальные магнитные моменты становятся равными $1.9\mu_B$ и $2.3\mu_B$ и направлены АФМ относительно моментов атомов в верхнем слое, соответственно.

Искажения локального окружения атомов железа приводят к существенному изменению электронной конфигурации: для стехиометрического YFeO_3 в расчете было получено высокоспиновое состояние, в котором все 5 орбиталей с одним спином заселены, а орбитали с противоположным спином практически пустые. В случае тонкой пленки собственные значения матриц заселенности для атомов в нижней плоскости (Fe_2), окруженных кислородным октаэдром, для спина вверх равняются: 0.58, 0.93, 0.99, 0.99, 0.99, для спина вниз: 0.18, 0.2, 0.25, 0.65, 0.99. Данную конфигурацию можно рассматривать как промежуточное-спиновое состояние со спином 4/2: один электрон из зоны со спином вверх, расположенный на $d(3z^2 - r)$ орбитали, переходит на зону со спином вниз и заселяет $d(xy)$ орбиталь t_{2g} подзоны. Для атома в верхней плоскости (Fe_3), имеющего окружение в форме пирамидки, и магнитный момент которого ориентирован в противоположную сторону (АФМ), заселенности орбиталей для спина вверх равняются: 0.12, 0.14, 0.14, 0.37, 0.97, для спина вниз: 0.89, 0.96, 0.99, 0.99, 0.99. Необходимо отметить, что вследствие изменения расстояния Fe-O и возрастания гибридизации с p -орбиталями кислорода суммарная заселенность d -орбиталей увеличивается. Такую орбитальную конфигурацию можно рассматривать как d^6 , а сам ион железа находится в высокоспиновом состоянии, которому тоже будет соответствовать спин 4/2. Для остальных двух атомов железа получается аналогичная электронная конфигурация. Разница в величинах магнитных моментов может быть объяснена возникшей разницей в объемах октаэдров и пирамидок и усилением гибридизации между d -орбиталями железа и p -орбиталями кислорода вследствие уменьшения среднего расстояния Fe-O. В работе [22] для термообработанных в кислородной атмосфере толстых пленок YFeO_3 с помощью исследований методами ЯМР было показано возникновение неоднородности распределения локальных магнитных полей на масштабах межатомного расстояния, что авторы интерпретировали как появление двух неэквивалентных позиций ионов железа с разной валентностью $4s^0 3d^6 \text{ Fe}^{2+}$ ($S = 4/2$) и $4s^0 3d^5 \text{ Fe}^{3+}$ ($S = 5/2$). Необходимо отметить, что данные исследования были выполнены для толстых пленок $\sim 880 \text{ нм}$, кристаллическая структура которых мало отличалась от объемных монокристаллических образцов. Для таких пленок было показано наличие двух областей: слой 50 нм вблизи интерфейса с сильной деформацией за счет

эпитаксиального растяжения и расположенный выше слой со структурой, близкой к объемным монокристаллическим образцам [21]. Результаты расчетов позволяют предложить еще одно объяснение результатам ЯМР экспериментов: часть ионов железа в глубине пленки вследствие сильных искажений кристаллической структуры переходит из высокоспинового в промежуточнospинное состояние со спином $S = 4/2$. А атомы на поверхности или расположенные рядом с кислородной вакансией, имеющее окружение в виде пирамидки, имеют электронную конфигурацию d^6 с такой же величиной спина $S = 4/2$, как и предполагали авторы статьи. Рассмотренная ячейка не позволяет получить более сложное магнитное упорядочение, и для более точного описания влияния эпитаксиальной деформации необходимо рассмотреть ячейки с большим числом неэквивалентных атомов железа и кислородными вакансиями, что в рамках первопринципных расчетов может быть сопряжено с большими техническими сложностями.

Таблица 2. Значения магнитного момента, смещение атома железа из плоскости FeO_2 и объем соответствующего октаэдра/пирамидки. Fe_4 и Fe_3 располагаются в поверхностном слое, Fe_2 и Fe_1 – в нижнем слое. В нижней строке приведены данные для атома железа в стехиометрическом YFeO_3

	μ, μ_B	Смещение, Å	$V, \text{Å}^3$
Fe_4 (пирамидка)	2.77	0.13	4.9
Fe_3 (пирамидка)	3.10	0.12	5.1
Fe_2 (октаэдр)	2.29	0.02	10.1
Fe_1 (октаэдр)	1.89	0.02	9.6
Fe	3.6	0.00	10.6

Обменные параметры в модели Гейзенберга. Для исследования изменения дальнего магнитного порядка вследствие эпитаксиальной деформации и понимания микроскопических причин удобно применять модельный подход в рамках модели Гейзенберга.

$$\hat{H} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (1)$$

где i и j – индексы узлов, J_{ij} – параметр обменного взаимодействия между узлами i и j , $S_{i(j)}$ локальный момент на узлах $i(j)$. Параметры обменного взаимодействия могут быть получены из полных энергий различных типов дальнего магнитного упорядочения или с использованием метода, описанного в работах [36, 37], с помощью построения эффективного гамильтониана на атомно-центрированных функциях Ванье, который и был использован в данной работе. Данный подход позволяет избавиться от погрешностей, вызванных изменением величин локальных

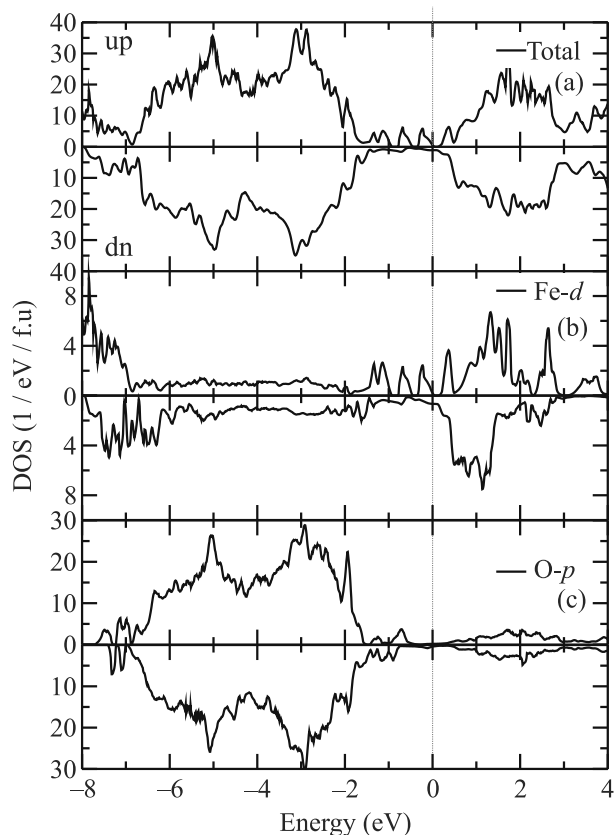


Рис. 3. Плотность состояний для тонкой пленки YFeO_3 . На верхней панели полная плотность состояний, на панели (b) – парциальные плотности состояний Fe- d (черные сплошные линии) на (c) – O- p (черные сплошные линии) для спинов вверх и вниз

моментов, возникающим при рассмотрении разных типов магнитного порядка.

Для построения модельного гамильтониана был выбран базис d -орбиталей Fe и p -орбиталей O, которые дают максимальный вклад в состояния вблизи уровня Ферми. Из анализа кристаллической структуры можно предположить, что наибольшее влияние будут иметь взаимодействия, ограниченные третьей координационной сферой. В данной работе были рассчитаны следующие обменные параметры между атомами железа: обменное взаимодействие с ближайшим соседом J_1 , обменное взаимодействие по диагонали грани элементарной ячейки J_2 и взаимодействие атомов из разных плоскостей по диагонали элементарной ячейки J_3 . Результаты представлены в табл. 3.

Расчеты параметров обменного взаимодействия между атомами Fe в модели Гейзенберга показывают, что в стехиометрическом YFeO_3 выделяется один большой по значению АФМ обменный параметр

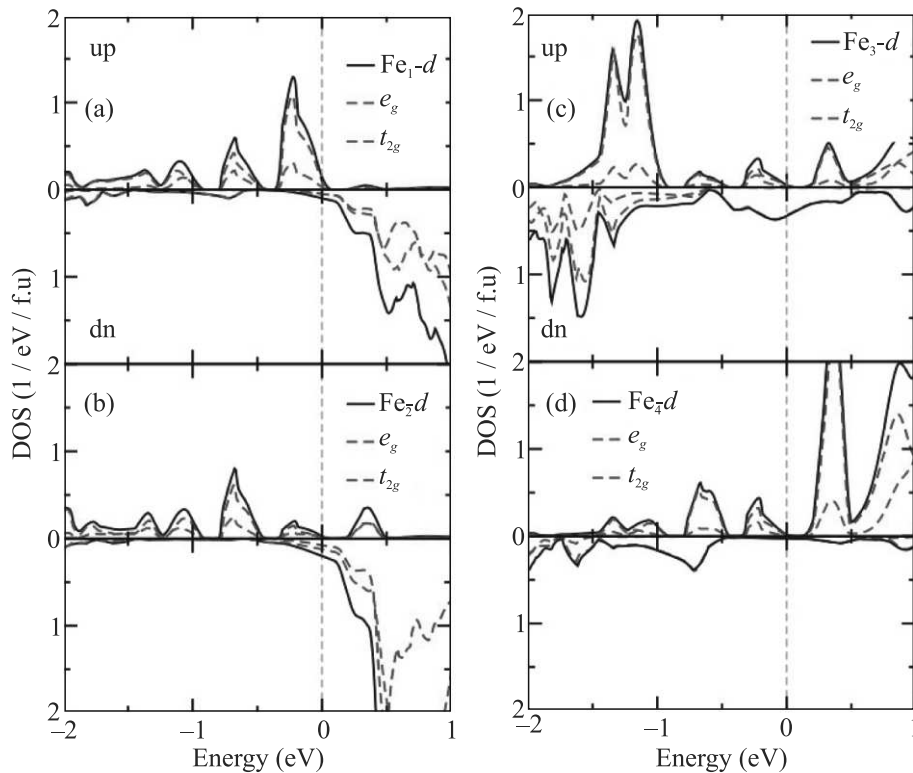


Рис. 4. (Цветной онлайн) Плотность состояний d -оболочки атомов Fe для тонкой пленки YFeO_3 (черные сплошные линии), t_{2g} – подзоны (красные пунктирные линии), e_g (зеленые пунктирные линии) для спинов вверх и вниз

Таблица 3. Значения обменных параметров. $J_1^\perp$ – взаимодействие вдоль кристаллографической оси c , $J_1^\parallel$ – взаимодействие в плоскости ab в рамках первой координационной сферы

	$J_1^\perp$, K	$J_1^\parallel$, K	J_2 , K	J_3 , K
YFeO_3	–510	–510	–10	2
$\text{YFeO}_3/\text{SrTiO}_3$	–317	–40	12	–6

между ближайшими соседями во всех направлениях, что приводят к стабилизации G-типа АФМ порядка, параметры обменного взаимодействия с остальными более дальними соседями на порядки меньше. Для тонкой пленки $\text{YFeO}_3/\text{SrTiO}_3$ вследствие эпитаксиальной деформации и смене состояния d -Fe с высокоспинового на промежуточнospиновое остается единственный большой АФМ параметр обменного взаимодействия между атомами железа вдоль кристаллографической оси c , параметры обменного взаимодействия между атомами железа в плоскости, перпендикулярной оси c в рамках первой координационной сферы имеют также АФМ знак, но становятся на порядок ниже. Параметр обменного взаимодействия в плоскости ab между атомами второй координационной сферы, имеет ФМ знак, что соответствует А-типу АФМ порядка. Такое изменение параметров обменного взаимодействия приводит к смене G-типа

на А-тип дальнего магнитного порядка, который в результате прямого $\text{GGA} + U$ расчета имел наименьшую энергию.

Расчет электрической поляризации. В тонкой пленке вследствие эпитаксиальной деформации атомы Fe смещаются из верхней плоскости FeO_2 , что должно приводить к возникновению дипольного момента и спонтанной электрической поляризации. В данной работе расчет электрической поляризации был проведен в рамках метода, основанного на расчете фазы Берри [38, 39]. Было получено, что в тонкой пленке возникает спонтанная электрическая поляризация величиной 15.1 мКл/см^2 , что находится в согласии с экспериментом [20]. Расчет для стехиометрического образца показал, что в нем спонтанная поляризация отсутствует, поскольку атомы Fe находятся в центрах кислородных октаэдров. Проведенные расчеты показывают, что эпитаксиальная деформация позволяет существенно изменять магнитные свойства YFeO_3 и одновременно вызывает спонтанную электрическую поляризацию.

Заключение. В данной работе в рамках метода $\text{GGA} + U$ были исследованы электронная структура и магнитные свойства стехиометрического YFeO_3 и YFeO_3 , нанесенного тонкой пленкой на подложку

SrTiO_3 . В расчете было получено, что в стехиометрическом YFeO_3 наименьшую полную энергию имеет G-тип АФМ упорядочения, что полностью согласуется с экспериментом, и сам он является диэлектриком с величиной запрещенной щели 1.8 эВ. Расчет с полной релаксацией атомных позиций, выполненный в рамках метода $\text{GGA} + U$ для тонкой пленки $\text{YFeO}_3/\text{SrTiO}_3$, показал, что тип дальнего магнитного порядка изменяется с G-типа АФМ в стехиометрическом YFeO_3 на сложное ферримагнитное упорядочение, близкое к А-типу и переходу в металлическую фазу с небольшой плотностью состояний на уровне Ферми. Полная релаксация привела к возникновению существенных искажений, преимущественно в верхней плоскости FeO , и смещению атома железа из плоскости FeO_2 , а сама плоскость дополнительно искажается за счет поворота и наклона пирамидок FeO_5 относительно оси c на угол 16° и 19° повороту на 1.6° и 1.2° соответственно. В свою очередь, эти искажения привели к изменению спинового состояния ионов железа, расположенных в центре кислородных октаэдров с высокоспинового с величиной $3.6 \mu_B$, как в стехиометрическом YFeO_3 , на промежуточнospинное состояние со спином $S = 4/2$. При этом один электрон из зоны со спином вверх, расположенный на $d(3z^2 - r)$ орбитали, переходит на зону со спином вниз и заселяет $d(xy)$ орбиталь t_{2g} подзоны. Величина магнитных моментов для атомов нижнего слоя уменьшается до $1.9 \mu_B$ и $2.3 \mu_B$. Ионы железа, расположенные в поверхностном слое, имеющие окружение в виде пирамидок, имеют электронную конфигурацию d^6 , которой соответствует такой же спин $S = 4/2$. Величины магнитных моментов равны $2.8 \mu_B$ и $3.1 \mu_B$. Полученный результат позволяет предложить новую интерпретацию данным ЯМР измерений [22]. Смещение атома железа из плоскости FeO_2 приводит к возникновению электрической поляризации величиной 15.1 мКл/см^2 .

Смена типа дальнего магнитного порядка в тонкой пленке связана с изменением величин обменного взаимодействия между атомами железа. Параметры обменного взаимодействия в модели Гейзенберга, рассчитанные для стехиометрического YFeO_3 , показывают, что существует большой по величине АФМ обменный параметр между атомами железа в первой координационной сфере, а обмен между вторыми и более дальними соседями на два порядка меньше. В случае тонкой пленки $\text{YFeO}_3/\text{SrTiO}_3$ из-за искажений кристаллической структуры остается один большой обменный параметр между атомами железа, расположенными вдоль оси c , а обмен между атомами железа первой координационной сферы в плос-

кости ab , хотя и имеет АФМ знак, на порядок ниже, что приводит к смене типа дальнего магнитного порядка с G- на А-тип. Обмен между вторыми соседями в плоскости ab имеет ФМ знак, что дополнительно стабилизирует формирование АФМ А-типа.

В ходе исследования было выявлено, что эпитаксиальная деформация приводит к существенным изменениям магнитных и проводящих свойств, а также к возникновению спонтанной электрической поляризации в YFeO_3 , что говорит о возможности получения свойств мультиферроика и изменения величины магнитного момента и типа дальнего порядка в тонкопленочном YFeO_3 путем выбора подложки с подходящими составом и ориентацией.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема “Электрон”, # 122021000039-4) при частичной поддержке Российского научного фонда (проект # 19-72-30043).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. H. Schmid, *Ferroelectrics* **162**(1), 317 (1994).
2. W. Eerenstein, N. D. Mathur, and J. F. Scott, *Nature* **442**, 759 (2006).
3. S.-W. Cheong and M. Mostovoy, *Nat. Mater.* **6**, 13 (2007).
4. D. Khomskii, *Physics* **2**, 20 (2009).
5. M. Gajek, M. Bibes, S. Fusil, K. Bouzehouane, J. Fontcuberta, A. Barthélémy, and A. Fert, *Nat. Mater.* **6**, 292 (2007).
6. V. V. Shvartsman, W. Kleemann, R. Haumont, and J. Kreisel, *Appl. Phys. Lett.* **90**(17), 172115 (2007).
7. N. A. Hill, *J. Phys. Chem. B* **104**(29), 6694 (2000).
8. J. Wang, *Science*, **299**(5613), 1719 (2003).
9. R. Ramesh and N. A. Spaldin, *Nat. Mater.* **6**(1), 21 (2007).
10. A. Fernandez, M. Acharya, H.-G. Lee, J. Schimpf, Y. Jiang, D. Lou, Z. Tian, and L. W. Martin, *Adv. Mater.* **34**(30), 2108841 (2022).
11. Z.-l. Yuan, Y. Sun, D. Wang, K.-Q. Chen, and L.-M. Tang, *J. Phys. Condens. Matter* **33**(40), 403003 (2021).
12. D. G. Schlom, J. H. Haeni, J. Lettieri, C. D. Theis, W. Tian, J. C. Jiang, and X. Q. Pan, *Materials Science and Engineering: B* **87**(3), 282 (2001).
13. N. Fujimura, T. Ishida, T. Yoshimura, and T. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **69**(7), 1011 (1996).
14. J. Ma, J. Hu, Z. Li, and C.-W. Nan, *Adv. Mater.* **23**(9), 1062 (2011).
15. Z. X. Cheng, H. Shen, J. Y. Xu, P. Liu, S. J. Zhang, J. L. Wang, X. L. Wang, and S. X. Dou, *J. Appl. Phys.* **111**(3), 034103 (2012).

16. G. Padmasree, S. Shravan Kumar Reddy, J. Ramesh, P. Yadagiri Reddy, and Ch. Gopal Reddy, *Mater. Res. Express* **7**, 116103 (2020).
17. N. O. Khalifa, H. M. Widadallah, A. M. Gismelseed, F. N. Al-Mabsali, R. G. S. Sofin, and M. Pekala, *Hyperfine Interactions* **237**, 46 (2016).
18. G. Padmasree, P. Yadagiri Reddy, and Ch. Gopal Reddy, *Ceramics International* **48**(19), 28980 (2022).
19. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, М. В. Четкин, *УФН* **146**(3), 417 (1985).
20. M. Shang, C. Wang, Y. Chen, F. Sun, and H. Yuan, *Mater. Lett.* **175**, 23 (2016).
21. J. Scola, P. Boullay, W. Noun, E. Popova, Y. Dumont, A. Fouchet, and N. Keller, *J. Appl. Phys.* **110**, 043928 (2011).
22. V. V. Ogloblichev, V. I. Izyurov, Yu. V. Piskunov, A. G. Smol'nikov, A. F. Sadykov, S. A. Chuprakov, S. S. Dubinin, S. V. Naumov, and A. P. Nosov, *JETP Lett.* **114**(1), 29 (2021).
23. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
24. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991).
25. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, *J. Phys. Condens. Matter* **9**(4), 767 (1997).
26. M. Cococcioni, *Phys. Rev. B* **71**(5), 35015 (2005).
27. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
28. G. Prandini, A. Marrazzo, I. E. Castelli, N. Mounet, and N. Marzari, *npj Computational Materials* **4**, 72 (2018).
29. A. Shorikov, *JETP Lett.* **116**(9), 634 (2022).
30. N. O. Vambold, G. A. Sazhaev, and I. V. Leonov, *JETP Lett.* **118**, 886 (2023).
31. K. Kitayama, M. Sakaguchi, Y. Takahara, H. Endo, and H. Ueki, *J. Solid State Chem.* **177**, 1933 (2004).
32. M. Eibschütz, S. Shtrikman, and D. Treves, *Phys. Rev.* **156**, 562 (1967).
33. D. Du Boulay, E. N. Maslen, V. A. Streltsov, and N. Ishizawa, *Acta Crystallographica Section B Structural Science* **51**(6), 921 (1995).
34. M. A. Butler, D. S. Ginley, and M. Eibschutz, *J. Appl. Phys.* **48**(7), 3070 (1977).
35. B. C. Tofield and B. E. F. Fender, *J. Phys. Chem. Solids* **31**, 2741 (1970).
36. D. Korotin, A. V. Kozhevnikov, S. L. Skornyakov, I. Leonov, N. Binggeli, V. I. Anisimov, and G. Trimarchi, *Eur. Phys. J. B* **65**, 91 (2008).
37. Dm. M. Korotin, V. V. Mazurenko, V. I. Anisimov, and S. V. Streltsov, *Phys. Rev* **91**, 224405 (2015).
38. R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **47**(3), 1651 (1993).
39. D. Vanderbilt, *J. Phys. Chem. Solids* **61**(2), 147 (2000).

Рост силицена методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, модифицированных электронным облучением¹⁾

А. Ф. Зиновьева^{+,2)}, В. А. Зиновьев⁺, А. В. Кацюба⁺, В. А. Володин^{+,*}, В. И. Муратов^{*},
А. В. Двуреченский^{+,*}

⁺Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 6 марта 2024 г.

После переработки 30 марта 2024 г.

Принята к публикации 1 апреля 2024 г.

Впервые экспериментально продемонстрирована возможность получения силицена на модифицированных электронным облучением подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$. Показано, что формирующиеся под электронным пучком участки планарной поверхности CaSi_2 с гексагональной упаковкой могут быть использованы как естественная основа для последующего роста силицена. На таких поверхностях проведено осаждение кремния и методами атомно-силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света получено подтверждение формирования островков силицена.

DOI: 10.31857/S123456782409009X, EDN: DHFOUQ

В настоящее время двумерные графеноподобные кристаллы на основе элементов IV группы рассматриваются в качестве одних из самых перспективных материалов для создания приборов будущего поколения. Такие материалы, как силицен, германен, привлекают внимание исследователей с точки зрения уникальных свойств, обусловленных их схожестью с графеном, а прямая совместимость с существующей кремниевой технологией делает развитие методов получения этих материалов очень актуальным. В отличие от графена прямой метод отслаивания не годится для получения силицена и германена, поэтому на данный момент метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) рассматривается как основной метод создания этих материалов [1]. Существует уже довольно много экспериментальных работ по росту двумерных слоев элементов IV группы, основные положительные результаты, получены на металлических подложках [2–5]. Силицен был выращен на подложке $\text{Ag}(111)$, а германен на подложках $\text{Au}(111)$ и $\text{Pt}(111)$ [6]. Однако с точки зрения практического использования в электронике более удобным является рост на подложках из непроводящих материалов. Существуют теоретические предпосылки, что силицен будет хорошо совместим с подложкой CaF_2

[7]. В пользу этого говорят также эксперименты по формированию на подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ пленок дисилицида кальция CaSi_2 [8–10], а последний является по сути материалом, состоящим из слоев силицена, интеркалированных кальцием. Есть работы, где с помощью специальной химической обработки CaSi_2 получают свободностоящий силицен. В работе [11] были получены многослойные структуры оксида силицена и мультисилицена при удалении атомов Ca из кристаллов CaSi_2 в концентрированной соляной кислоте. Для получения отдельных слоев силицена и оксида силицена полученные вещества были обработаны ультразвуком с последующим центрифугированием. Также, в этой работе были измерены спектры комбинационного рассеяния света (КРС) для свободностоящего силицена разной степени окисленности. Было получено, что для неокисленного силицена основной пик КРС находится при $\sim 495 \text{ см}^{-1}$ [11]. В работе [12] путем обработки кристаллов CaSi_2 в ионной жидкости на основе BF_4 были получены слои бисилицена, встроенного между слоями CaF_2 . Эти результаты показывают, что материалы CaF_2 и CaSi_2 могут быть использованы, как основа для получения силицена. Недавно нами были опубликованы результаты по росту методом МЛЭ протяженных двумерных островков кремния на подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ [13]. Была продемонстрирована возможность создания участков двумерных слоев Si

¹⁾См. дополнительный материал к статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: aigul@isp.nsc.ru

на CaF_2 . Показано, что рост кремниевых слоев происходит от ступеней, где есть возможность образования связей кремния с кальцием. Данные КРС демонстрируют пик при 418 см^{-1} и соответствуют колебаниям в двумерной плоскости атомов кремния, интеркалированных кальцием, свидетельствуя скорее о начальном росте слоев CaSi_2 , чем о формировании свободностоящего силицена. Для роста силицена необходимо, чтобы поверхность подложки имела гексагональную решетку. Такую решетку получают, например, осаждая на $\text{Si}(111)$ монослой серебра [14]. Поверхность подложки модифицируется, переходя в $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3} R 30^\circ - \text{Ag}$, что обеспечивает при осаждении кремния рост силицена. В данной работе для роста силицена предложено использовать модифицированные электронным облучением подложки $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ с гексагональной упаковкой поверхности. На таких подложках проведено осаждение кремния и методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и КРС получено подтверждение формирования островков силицена.

Разработанный метод непосредственно связан с получением пленок CaSi_2 с использованием электронного облучения в процессе роста слоев CaF_2 на подложках $\text{Si}(111)$ с помощью МЛЭ [8, 9]. Метод основан на явлении радиолиза, электронно-стимулированном распаде CaF_2 на Ca и F [15] в поверхностных слоях пленки. Фтор десорбируется с поверхности, а оставшиеся атомы кальция химически связываются с атомами кремния, поступающими из подложки Si при достаточно высоких температурах ($> 300^\circ\text{C}$) под действием электронного облучения [10]. Силицид кальция, сформированный под электронным пучком при осаждении CaF_2 , представляет собой неоднородный трехмерный материал в виде треугольной сети вытянутых кристаллитов, выступающих из поверхности пленки CaF_2 на десятки нанометров [9], что, естественно, не подходит для осуществления роста силицена. Согласно литературным данным [16–18] одной из причин формирования непланарной пленки CaSi_2 является недостаток атомов кремния. При достаточном количестве кремния рост пленки идет через образование двумерных островков CaSi_2 , лежащих в плоскости роста $\text{Si}(111)$. Для улучшения планарности пленки мы применили два подхода: осаждение дополнительного Si в процессе роста CaF_2 при одновременном облучении электронами и постростовое электронное облучение [13, 19]. Последнее так же должно привести к росту более однородной и планарной пленки, поскольку решает проблемы с остаточными включениями CaF_2 , разлагая их на Ca и F и давая возможность разрас-

таться уже сформировавшимся двумерным островкам CaSi_2 .

Эксперименты проводились на установке молекулярно-лучевой эпитаксии Катунь-100, оснащенной эффузионным источником CaF_2 с графитовым тиглем в условиях сверхвысокого вакуума. Пленки выращивались на подложках $\text{Si}(111)$. Было выращено два образца: тестовый образец для контроля состояния поверхности перед осаждением кремния и второй образец, на котором были реализованы все этапы роста, отработанные на тестовом образце, и дополнительно осажден кремний. Перед ростом для всех образцов была проведена стандартная процедура двойной очистки поверхности [20]. В качестве источника электронов использовалась электронная пушка, входящая в состав блока дифракции быстрых электронов (ДБЭ), используемого для контроля состояния поверхности при молекулярно-лучевой эпитаксии. Облучение электронным пучком проводилось при ускоряющем напряжении 20 кэВ и плотности тока 50 А/см^2 . Угол падения пучка составлял 4° . Тот же электронный пучок использовался для модификации свойств растущей пленки. Эпитаксиальная пленка CaF_2 выращивалась при скорости осаждения 0.3 Å/с . Как показали наши предыдущие исследования, под пучком на поверхности растущей пленки при осаждении CaF_2 формируется полоса с характерным металлическим блеском (шириной 1–2 мм), которая представляет собой различные полиморфы CaSi_2 в зависимости от условий осаждения CaF_2 [8–10]. В данной работе для получения планарной пленки CaSi_2 , на начальной стадии роста был применен метод твердофазной эпитаксии с последующим отжигом. При температуре 200°C был осажден слой CaF_2 толщиной 2 нм, после чего проводился отжиг при температуре 600°C до появления на картине ДБЭ кристаллических рефлексов. Это позволило сформировать под электронным пучком тонкий слой, обогащенный кальцием. Такая поверхность является более подходящей для формирования двумерных структур на основе кремния, поскольку обладает большей поверхностной энергией по сравнению с CaF_2 [21] и частично решает проблему неудачного соотношения поверхностных энергий кремния и CaF_2 [22]. Как показали наши эксперименты [16], при осаждении кремния на эту поверхность под электронным пучком идет формирование двумерных островков CaSi_2 , лежащих в плоскости (111).

На следующем этапе было проведено последовательное осаждение 8-ми парных слоев CaF_2 и Si тол-

щиной 2 и 0.6 нм (2 бислоя), соответственно. Каждый раз после осаждения кремния рост приостанавливался на 2 мин, что обеспечивало дополнительное облучение поверхности электронами в области под электронным пучком. После осаждения последнего слоя кремния время облучения было увеличено до 15 мин. При этом электронный пучок не сдвигался, то есть в течение всего роста облучался один и тот же участок поверхности. Это было сделано в соответствии с нашими предыдущими результатами, показавшими, что постростовое электронное облучение в течение ~ 15 минут приводит к увеличению числа и размеров двумерных островков CaSi_2 [19]. Все ростовые процедуры (кроме начальной) и облучение проводились при температуре 550°C . Такая температура роста была выбрана, основываясь на результатах работы [23], где был найден диапазон температур, оптимальных для получения планарной поверхности пленок $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, имеющих толщину порядка 10 нм.

После 15-минутного облучения тестовый образец был выгружен из вакуумной камеры, и проведены АСМ и КРС исследования области, модифицированной электронным пучком. АСМ исследование подтвердило формирование двумерных шестиугольных островков на поверхности, что согласуется с результатами, полученными ранее [19]. Таким образом, тестовый образец, по сути, можно рассматривать как template для выращивания силицена. Исследование методом КРС тестового образца продемонстрировало стандартный набор трех пиков КРС, соответствующий CaSi_2 (3R полиморф [8]).

После тестового эксперимента был выращен образец, на котором были реализованы все процедуры для создания template-поверхности. На последнем шаге, после 15-минутного облучения, электронный пучок был выключен, и на поверхность было осаждено 10 монослоев кремния. Сразу же после роста были проведены исследования методами КРС и АСМ области, предварительно модифицированной электронным пучком. Описание экспериментальных методик дано в дополнительных материалах к статье.

Результаты АСМ измерений образца после осаждения кремния (рис. 1) показали, что поверхность в целом сохраняет гексагональную структуру. На поверхности уже сформированных на предыдущем этапе двумерных островков CaSi_2 появляются новые островки меньшего размера (см. схему на рис. 2). Профиль АСМ типичного шестиугольного островка (рис. 3) показывает наличие ступеней высотой, кратной ≈ 0.3 нм. Согласно работе [24], высота ступени между слоями в мультисилицене должна составлять

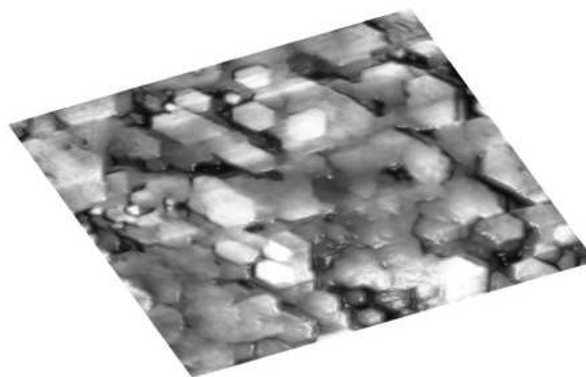


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рельеф поверхности образца с кремнием, осажденным после электронного облучения, полученный методом атомно-силовой микроскопии. Размер области 1.5×1.5 мкм

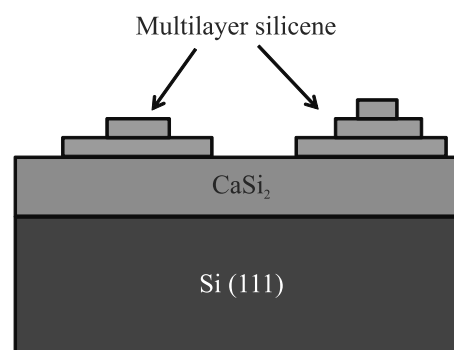


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схематическое изображение образца с кремнием, осажденным после электронного облучения

≈ 0.3 нм, и полученное значение является весомым аргументом в пользу вывода о формировании островков мультисилицена. На рисунке 4 на поверхности отдельного шестиугольного островка видны новые образовавшиеся островки с типичным латеральным размером ≈ 25 нм и высотой ≈ 0.3 нм. В допол-

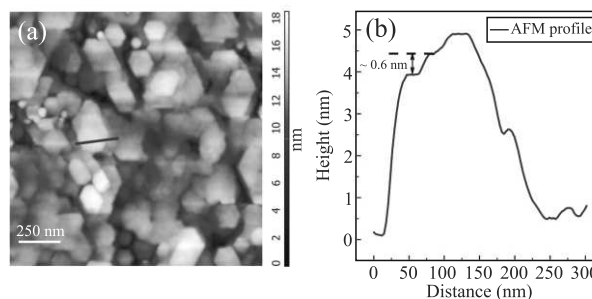


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – АСМ-изображение и (b) – АСМ-профиль поверхности образца с кремнием, осажденным после электронного облучения

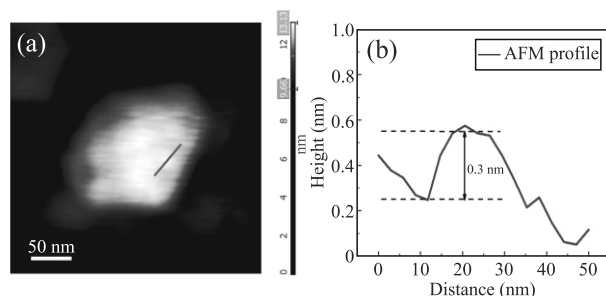


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – АСМ-изображение участка поверхности с двумерным шестиугольным островком после осаждения 10 МС кремния. Выбранный диапазон высот рельефа указан на шкале справа от изображения. Диапазон высот был выбран так, чтобы островки силицена на поверхности были различимы. (b) – АСМ-профиль образовавшегося островка силицена

нительных материалах дано 3D изображение данной области (рис. S1). В целом, полученный рельеф поверхности похож на наблюдаемый в работе [25], где островки мультисилицена были получены на методе МЛЭ на подложке Ag(111). Сравнение с результатами работ [24, 25] позволяет предположить, что рост мультисилицена на начальном этапе (~ 1 МС осажденного кремния) идет через формирование протяженных террас, на поверхности которых при дальнейшем осаждении кремния формируются террасы меньшего размера, и так далее. На рисунке 4 мы видим, скорее всего, островки последнего верхнего слоя мультисилицена.

Результаты КРС (рис. 5) показали, что в спектрах образцов с осажденным Si слоем присутствует плечо в окрестности $\approx 495 \text{ см}^{-1}$, которого нет в спектрах тестовых образцов (см. рис. S2 в дополнительных материалах). При вычитании спектра подложки, в данной области проявляется пик КРС, соответствующий свободностоящему силицену. Остальные пики, в частности тройка пиков при 341 см^{-1} , 386 см^{-1} , 413 см^{-1} , характерных для CaSi_2 [8] (polymorph 3R) наблюдаются и для тестовых образцов, а пик при 443 см^{-1} соответствует гетерогранице $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ [13]. Следует отметить, что для силицена, выращенного на модифицированных серебром подложках $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3} R 30^\circ - \text{Ag}$, сигнал КРС наблюдается при $\approx 524 \text{ см}^{-1}$, что обусловлено влиянием подложки [14]. В нашем случае влиянием подложки на верхние слои силицена можно пренебречь, ведь силицен растет на силиcene, поскольку CaSi_2 – это материал, составленный из слоев силицена, интеркалированных кальцием [26]. Возможно, для первого слоя силицена влиянием атомов кальция пренебречь нельзя,

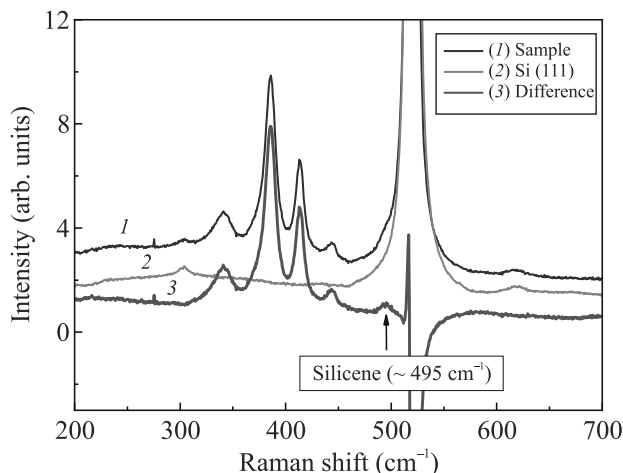


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры КРС от образца с кремнием, осажденным после электронного облучения и от подложки Si(111). Для выделения пика КРС, связанного с силиценом, произведено вычитание этих спектров

зая, и атомы этого слоя дают вклад в пик КРС при 413 см^{-1} , соответствующий двумерным колебаниям атомов кремния, интеркалированных кальцием [27], тогда как более высоколежащие слои силицена дают вклад в сигнал при 495 см^{-1} .

Таким образом, в данной работе продемонстрировано, что сформированная под электронным пучком поверхность CaSi_2 с гексагональной упаковкой может быть использована как естественный template для последующего роста силицена. Созданные структуры с островками силицена, выращенными на подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, модифицированных электронным облучением, являются первым шагом в направлении создания двумерных графеноподобных структур с использованием подложек такого типа. Полученные результаты могут быть использованы в дальнейшем для разработки методов получения не только силицена, но и других трансграфенов на основе элементов IV группы.

Авторы выражают благодарность ЦКП “ВТАН” НГУ и ЦКП “Наноструктуры” ИФП СО РАН за предоставление измерительного оборудования.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема #FWGW-2022-0011 Физические явления в квантовых структурах для компонент наноэлектроники, нанопотоники и спинтроники).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. К. А. Лозовой, В. В. Дирко, В. П. Винарский, А. П. Коханенко, А. В. Войцеховский, Н. Ю. Акименко, *Изв. вузов. Физика* **63**, 104 (2021).
2. P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155501 (2012).
3. B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Chen, and K. Wu, *Nano Lett.* **12**, 3507 (2012).
4. D. Chiappe, C. Grazianetti, G. Tallarida, M. Fanciulli, and A. Molle, *Adv. Mater.* **24**, 5088 (2012).
5. H. Enriquez, S. Vizzini, A. Kara, B. Lalmi, and H. Oughaddou, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 314211 (2012).
6. M. E. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, and G. Le Lay, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014).
7. S. Kokott, P. Pflugradt, L. Matthes, and F. Bechstedt, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 185002 (2014).
8. A. Kacyuba, A. Dvurechenskii, G. Kamaev, V. Volodin, and A. Krupin, *Mater. Lett.* **268**, 127554 (2020).
9. A. V. Dvurechenskii, A. V. Kacyuba, G. N. Kamaev, V. A. Volodin, and Z. V. Smagina, *Nanomaterials* **12**, 1407 (2022).
10. A. Kacyuba, A. Dvurechenskii, G. Kamaev, V. Volodin, and A. Krupin, *J. Cryst. Growth* **562**, 126080 (2021).
11. R. Gonzalez-Rodriguez, R. M. del Castillo, E. Hathaway, Y. Lin, J. L. Coffey, and J. Cui, *ACS Appl. Nano Mater.* **5**, 4325 (2022).
12. R. Yaokawa, T. Ohsuna, T. Morishita, Y. Hayasaka, M. J. S. Spencer, and H. Nakano, *Nat. Commun.* **7**, 10657 (2016).
13. В. А. Зиновьев, А. Ф. Зиновьева, В. А. Володин, А. К. Гутаковский, А. С. Дерябин, А. Ю. Крупин, Л. В. Кулик, В. Д. Живулько, А. В. Мудрый, А. В. Двуреченский, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 608 (2022).
14. P. De Padova, H. Feng, J. Zhuang, Z. Li, A. Generosi, B. Paci, C. Ottaviani, C. Quaresima, B. Olivieri, M. Krawiec, and Y. Du, *Phys. Chem. C* **121**, 27182 (2017).
15. L. S. Charles, W. E. Moddeman, and J. T. Grant, *Appl. Phys. Lett.* **52**, 6921 (1981).
16. A. V. Dvurechenskii, A. V. Kacyuba, G. N. Kamaev, V. A. Volodin, N. P. Stepina, A. F. Zinovieva, and V. A. Zinovyev, *Mater. Proc.* **14**, 68 (2023).
17. G. Vogg, Martin S. Brandt, M. Stutzmann, and M. Albrecht, *J. Cryst. Growth* **203**, 570 (1999).
18. X. Meng, A. Ueki, H. Tatsuoka, and H. Itahara, *Chem. Eur. J.* **23**, 3098 (2017).
19. A. F. Zinovieva, V. A. Zinovyev, N. P. Stepina, V. A. Volodin, A. Y. Krupin, A. V. Kacyuba, and A. V. Dvurechenskii, *Nanomaterials* **12**, 3623 (2022).
20. V. A. Zinovyev, A. V. Kacyuba, V. A. Volodin, A. F. Zinovieva, S. G. Cherkova, Z. V. Smagina, A. V. Dvurechenskii, A. Y. Krupin, O. M. Borodavchenko, and V. D. Zhivulko, *Semiconductors* **55**, 808 (2021).
21. A. Klust, M. Grimsehl, and J. Wollschläger, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4483 (2003).
22. C. R. Wang, B. H. Muller, E. Bugiel, and K. R. Hofmann, *Appl. Surf. Si.* **211**, 203 (2003).
23. J. Suela, E. Abramof, P. H. O. Rappl, F. E. Freitas, H. Closs, and C. Boschetti, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44**, 185405 (2011).
24. P. Vogt, P. Capiod, M. Berthe, A. Resta, P. De Padova, T. Bruhn, G. Le Lay, and B. Grandidier, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 021602 (2014).
25. C. Grazianetti, E. Cinquanta, L. Tao, P. De Padova, C. Quaresima, C. Ottaviani, D. Akinwande, and A. Molle, *ACS Nano* **11**, 3376 (2017).
26. E. Noguchi, K. Sugawara, R. Yaokawa, T. Hitosugi, H. Nakano, and T. Takahashi, *Adv. Mater.* **27**, 856 (2015).
27. S. M. Castillo, Z. Tang, A. P. Litvinchuk, and A. M. Guloy, *Inorg. Chem.* **55**, 10203 (2016).

Электромагнитная прозрачность магнитной гетероструктуры в условиях многоволновой интерференции

О. С. Сухорукова^{+,*}, А. С. Тарасенко^{*}, С. В. Тарасенко^{*1)}, В. Г. Шавров[×]

⁺ Физико-технический факультет, Донецкий государственный университет, 283001 Донецк, Россия

^{*} Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, 283048 Донецк, Россия

[×] Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 февраля 2024 г.

После переработки 31 марта 2024 г.

Принята к публикации 5 апреля 2024 г.

На примере слоя оптически прозрачного магнитного диэлектрика между двух идентичных анизотропно проводящих металлоповерхностей (а также конечной одномерной сверхрешетки с таким элементарным периодом) изучены особенности резонансного фотонного прохождения, связанные с гибридизацией двух независимых механизмов формирования коллапса резонанса Фано: гиротропии и пространственной дисперсии. В частности показано, что возникновение в спектре излучения радиационных поляритонов интерференционного типа “темных” состояний с нулевой радиационной шириной может сопровождаться подавлением эффекта полной электромагнитной прозрачности слоя, который характерен для двухмодовой модели образования данного типа связанных состояний в континууме. При этом одновременно возникающая в слое радиационная поляритонная мода для фотонного кристалла рассматриваемого типа может стать сверхизлучательной, что приведет к практически полному фотонному отражению.

DOI: 10.31857/S1234567824090106, EDN: DVFQVQ

Поиск новых эффективных способов управления электромагнитной прозрачностью оптически анизотропной слоистой гетероструктуры при прохождении через нее электромагнитной (ЭМ) волны представляет в настоящее время значительный как научный, так и практический интерес [1]. В этой связи, несомненно, важными представляются результаты работы [2], в которой на примере квантового волновода с притягивающей примесью конечных размеров изучалось распространение электронных волн. В частности, было показано, что форма кривой прозрачности в зависимости от энергии электрона, проходящего через примесь, может представлять собой асимметричную кривую, характерную для резонанса Фано. Вследствие деструктивной двухмодовой интерференции в открытом канале излучения слияние максимума и минимума на такой кривой в некоторой точке (точке коллапса резонанса Фано) отвечает формированию на фоне сплошного спектра излучательных мод “темных” состояний с нулевой радиационной шириной линии. Это соответствует полной резонансной прозрачности такой примеси в данных условиях и позволяет характеризовать подобные “темные” состояния как связанные состояния в

континууме (ССК). Однако до сих пор значительные усилия по поиску аналогичных эффектов в оптике были сосредоточены, главным образом, на слоистых гетероструктурах с участием немагнитных диэлектриков [3, 4]. В частности, особый интерес в этом плане представляет изучение эффектов электромагнитной прозрачности открытых микрорезонаторов, но не вследствие когерентной оптической нелинейности, а как результат линейной оптики, сопутствующий формированию в сплошном спектре излучения таких структур особых точек – ССК (см., например, [5]). Вместе с тем, в последние годы большой исследовательский интерес привлекла также и идея создания быстродействующих и энергоэффективных устройств спиновой электроники за счет перехода от зарядовых токов к спиновым, в том числе и обусловленным спин-волновыми возбуждениями в диэлектриках (магнонами) [6]. В сочетании с необходимостью дальнейшего существенного повышения быстродействия устройств функциональной магнитоэлектроники это привело к формированию и бурному росту магнитной спинтроники на основе антиферромагнетиков (АФМ) [7] и ферримагнетиков (ФИМ) [8]. В таких магнитных диэлектриках спиновые токи формируются магнонами, собственные частоты которых за счет усиления межподреше-

¹⁾ e-mail: s.v.tarasenko@mail.ru

точным обменным взаимодействием могут достигать терагерцового частотного диапазона. В этих условиях становится актуальной задача об оптимизации резонансного магнотон-фотонного взаимодействия в открытом микрорезонаторе [9], заполненном АФМ или ФИМ средой [1, 5]. Надо, однако, учитывать, что, обладая дальним магнитным порядком, магнитные кристаллы (в том числе АФМ и ФИМ) являются средами с ярко выраженной пространственной дисперсией вследствие неоднородного обменного взаимодействия, причем его вклад в спектр магновов в этих средах также может быть обменно усиленным [8, 10]. Естественно, что в случаях, когда соответствующие магнотонные поляритоны являются еще и радиационными, это не может не сказаться на условиях формирования ССК в спектре излучения этих ЭМ возбуждений. Так в [11] на основе предложенного в [12] механизма двухмодовой деструктивной интерференции было показано возможность формирования за счет корректного учета пространственной дисперсии АФМ среды (неоднородного обменного взаимодействия) “темных” состояний интерференционного типа [13] в спектре излучения распространяющихся вдоль слоя негиротропного АФМ радиационных магнитных поляритонов. Однако в [11] рассматривались только такие сочетания магнитооптической конфигурации (МОК) и граничных условий, которые предполагали независимое распространение вдоль АФМ слоя магнитных поляритонов *ТМ*- и *ТЕ*-типа и один открытый во внешнюю среду канал излучения фотонов соответствующей поляризации.

Что же касается ФИМ, то он не только, как и АФМ, обладает пространственной дисперсией, но вне точки магнитной компенсации, даже в отсутствие постоянного внешнего поля, является также и гиротропной средой [8, 10]. Хорошо известно, что это приводит к дополнительным механизмам двулучепреломления уже на уединенной границе раздела гиротропной и негиротропной сред [14], и, в частности, к увеличению числа волн, вносящих свой вклад в структуру поля волноводных поляритонов *ЕН*-типа, распространяющихся вдоль такого слоя. Это означает, что для ФИМ слоя и в продольной, и в полярной МОК [10] изучение распространения этого типа ЭМ волн (как собственных, так и несобственных) должно быть основано на одновременном учете как эффектов гиротропии, так и эффектов пространственной дисперсии. Ранее в [15] была рассмотрена возможность формирования в открытом канале излучения за счет гиротропии “квази ССК” (высокодобротных (суперрезонансных согласно [16]) состояний), а в [17], на примере в двухмерном квантово-

механическом волноводе с резонатором субволнового размера, была показана важность учета многомодовой интерференции при формировании спектра ССК. Тем не менее, изучение влияния гибридизации гиротропии и пространственной дисперсии на электромагнитную прозрачность слоя ФИМ или конечного магнитного фотонного кристалла на его основе в условиях формирования “темных” состояний с нулевой радиационной шириной в сплошном спектре излучательных поляритонных мод (в точках коллапса резонанса Фано) до сих пор не проводилось. Выяснение этих вопросов и является целью предлагаемого сообщения.

Пусть имеется слой магнитного диэлектрика толщиной $2d$, связывающий между собой два идентичные по своим оптическим свойствам полупространства, занятые одноосным (ось анизотропии $\tilde{\mathbf{c}}$), оптически прозрачным немагнитным диэлектриком (“тильдой” отмечены все величины, относящиеся к данной среде) с материальными соотношениями вида [18]:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \left(\tilde{\varepsilon}_o \tilde{\mathbf{I}} + (\tilde{\varepsilon}_e - \tilde{\varepsilon}_o) \tilde{\mathbf{c}} \otimes \tilde{\mathbf{c}} \right), \quad \tilde{\mathbf{B}} = \tilde{\mathbf{H}}, \quad (1)$$

где $\tilde{\mathbf{I}}$ – единичный тензор, $\tilde{\mathbf{D}}$ и $\tilde{\mathbf{B}}$ – вектора электрической и магнитной индукции соответственно. Пусть $\mathbf{q}$ – нормаль к границе раздела сред, $\mathbf{a}$ – нормаль к плоскости падения волны, направление распространения волны вдоль слоя, $\tilde{\mathbf{c}} \parallel \mathbf{b}$. Для удобства и наглядности расчетов будем полагать, что для распространяющейся вдоль слоя объемной ЭМ волны *ЕН*-типа одновременное сосуществование открытого и закрытого каналов фотонного излучения обеспечивается наличием анизотропно проводящей поверхности (согласно терминологии [19]) на обеих его границах раздела со средой (1). В частности, если для выбранной плоскости распространения ЭМ волны вдоль слоя открытый канал излучения в среде (1) связан с волной *ТМ*-типа, то, следуя [19], его существование можно обеспечить наличием на границах раздела между слоем и неограниченной средой (1) метаповерхностей со следующими ЭМ характеристиками:

$$(\mathbf{E}\mathbf{a}) = (\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{a}) = 0, \quad (\mathbf{E}\mathbf{b}) = (\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{b}), \quad (2)$$

$$(\mathbf{H}\mathbf{a}) = (\tilde{\mathbf{H}}\mathbf{a}), \quad \xi = \pm d,$$

где ξ – текущая координата вдоль $\mathbf{q}$. Что же касается собственно гиротропной магнитной диэлектрической среды, формирующей слой обсуждаемой гетероструктуры (1), (2), то будем полагать, что это обменно коллинеарный, одноосный ФИМ. В качестве примера рассмотрим двухподрешеточную мо-

дель ($\mathbf{M}_{1,2}$ – намагниченности подрешеток, намагниченности насыщения которых $|\mathbf{M}_1| = M_{01}$ и $|\mathbf{M}_2| = M_{02}$ соответственно) обменно коллинеарного ФИМ с легкой магнитной осью OZ ($M_{1z} = M_{01}$, $M_{2z} = -M_{02}$) и плотностью энергии вида ([10]):

$$F = \delta \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2 + \frac{\alpha_1}{2} (\nabla \mathbf{M}_1)^2 + \frac{\alpha_2}{2} (\nabla \mathbf{M}_2)^2 - \frac{b_1}{2} \mathbf{M}_{1z}^2 - \frac{b_2}{2} \mathbf{M}_{2z}^2 - (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2, \mathbf{H}) + \frac{H^2}{8\pi} + \frac{\varepsilon_{\perp} (E_x^2 + E_y^2)}{8\pi} + \frac{\varepsilon_{\parallel} E_z^2}{8\pi}, \quad (3)$$

где δ – константа однородного междоузельного обмена, $\alpha_{1,2}$ и $b_{1,2} > 0$ – константы неоднородного обмена и легкоосной магнитной анизотропии внутри каждой из подрешеток соответственно. Динамика данной динамической системы определяется связанной системой уравнений, состоящей из уравнений Максвелла и уравнений Ландау–Лифшица. В соответствии с (3) для равновесного состояния $\mathbf{l}_0 \parallel OZ$ ($\mathbf{l}_0 \equiv \mathbf{M}_{01} - \mathbf{M}_{02}$) это приводит (см. также [8, 10]) к следующим материальным соотношениям в рассматриваемом легкоосном ферримагнетике (ЛО ФИМ):

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mu_{\perp} & -i\mu_{*} & 0 \\ i\mu_{*} & \mu_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{H},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & -i\varepsilon_{*} & 0 \\ i\varepsilon_{*} & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \mathbf{E},$$

$$\mu_{\perp} \equiv 1 + 4\pi\chi_{\perp}, \quad \mu_{*} \equiv 4\pi\chi_{*}. \quad (4)$$

$$\chi_{\perp} \equiv \frac{\chi_{1+} + \chi_{2+}}{2} + \frac{\chi_{1-} + \chi_{2-}}{2};$$

$$\chi_{*} \equiv \frac{\chi_{1+} + \chi_{2+}}{2} - \frac{\chi_{1-} + \chi_{2-}}{2};$$

$$\Delta_{\pm} \chi_{1\pm} \equiv \mp g_1 M_{01} (\omega \mp \omega_2) + g_1 g_2 \delta M_{01} M_{02};$$

$$\Delta_{\pm} \chi_{2\pm} \equiv \pm g_2 M_{02} (\omega \mp \omega_1) + g_1 g_2 \delta M_{01} M_{02};$$

$$\Delta_{\pm} \equiv (\omega \mp \omega_1)(\omega \mp \omega_2) + g_1 g_2 \delta^2 M_{01} M_{02} \equiv (\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-);$$

$$\omega_1 = g_1 (\delta M_{02} + b_1 M_{01} + \alpha_1 \mathbf{k}^2),$$

$$\omega_2 = g_2 (-\delta M_{01} - b_2 M_{02} - \alpha_2 \mathbf{k}^2).$$

В дальнейшем в качестве плоскости распространения ЭМ волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ и частотой ω , без ограничения общности, выберем плоскость $\mathbf{k} \in YZ$. В этом случае и для полярной ($\mathbf{q} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$), и для продольной ($\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{b} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$) МОК [10] нормальная к плоскости границы раздела компонента волнового вектора $\mathbf{k}$ в зависимости от ориентации вектора

$\mathbf{q}$ в плоскости $\mathbf{k} \in YZ$ с учетом (4) определяется из следующего характеристического уравнения:

$$D^{EH}(k_y, k_z, \omega) = 0, \quad D^{EH}(k_y, k_y, \omega) \equiv \left\{ \left[\frac{\mu_{\perp} \varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} k_y^2 + \mu_{\perp} k_z^2 - \varepsilon_{\perp} k_0^2 (\mu_{\perp}^2 - \mu_{*}^2) \right] \times \right. \\ \times \left[\frac{\varepsilon_{\perp} \mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} k_y^2 - \mu_{\perp} k_0^2 (\varepsilon_{\perp}^2 - \varepsilon_{*}^2) \right] - \\ \left. - k_z^2 k_0^2 (\varepsilon_{\perp} \mu_{*} + \mu_{\perp} \varepsilon_{*})^2 \right\} \Delta_{+} \Delta_{-}. \quad (5)$$

Полученное соотношение отвечает рассчитанному с учетом неоднородного обменного взаимодействия (4) спектру нормальных магнитных поляритонов EH -типа, распространяющихся при $\mathbf{k} \in YZ$, $\mathbf{l}_0 \parallel OZ$ в неограниченном ЛО ФИМ (3), (4). Так как (5) представляет собой линейное алгебраическое уравнение четвертой степени относительно $k_{\parallel}^2 = (\mathbf{k}\mathbf{q})^2$, то отсюда следует принципиальная возможность четырехлучевого преломления ЭМ волны на границе раздела негиротропной (1) и гиротропной (3) диэлектрических сред. Чтобы показать это более наглядно, обратимся к АФМ пределу рассматриваемой модели ЛО ФИМ (3), полагая что в этом случае $g_1 = g_2 = g$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, $b_1 = b_2 = b$, а магнитные подрешетки в модели (3)–(5) равны по величине и кристаллографически эквивалентны [8, 10]. В результате дисперсионное соотношение (5), совместное с (4) описывающее спектр магнитных поляритонов EH -типа в неограниченной модели ЛО ФИМ (5) в АФМ пределе (в точке магнитной компенсации), факторизуется, поскольку в выбранной МОК имеет место независимое распространение магнитных поляритонов TM - и TE -типа:

$$D^{EH} = (k_y, k_z, \omega) = D^{TE}(k_y, k_z, \omega) D^{TM}(k_y, k_z, \omega) = 0, \quad (6)$$

$$D^{TE}(k_y, k_z, \omega) \equiv (k_y^2 - \varepsilon_{\perp} k_0^2) (\omega_0^2 + s^2 k^2) (1 + \varepsilon) - \omega^2 + k_z^2 (\omega_0^2 + s^2 k^2 - \omega^2),$$

$$D^{TM}(k_y, k_z, \omega) \equiv (\varepsilon_{\perp} k_y^2 + \varepsilon_{\parallel} k_z^2 - \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel} (1 + \varepsilon) k_0^2) \times \\ \times (\omega_0^2 + s^2 k^2 - \omega^2) - \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel} k_0^2 \omega^2,$$

$$s = g M_0 \sqrt{\delta \alpha}, \quad \omega_0 = g M_0 \sqrt{\delta b},$$

$$\varepsilon \equiv 4\pi/\delta, \quad k_0 \equiv \omega/c.$$

Следует отметить, что соотношения (5) или (6) в зависимости от частоты определяют, в частности, форму сечения плоскостью падения ($\mathbf{k} \in YZ$) поверхности волновых векторов (ПВВ) поляритонной

волны в рассматриваемой ФИМ (или АФМ) среде без учета граничных условий. Анализ показывает, что в продольной МОК ($\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{k} \in YZ$, $\mathbf{l}_0 \parallel OZ$) уже для АФМ среды, обладающей пространственной дисперсией (6) при заданном ω как в случае магнитных поляритонов TM -, так и TR -типа с учетом $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ возможно формирование эффекта двулучепреломления (см. рис. 1). В тех случаях, когда для обоих

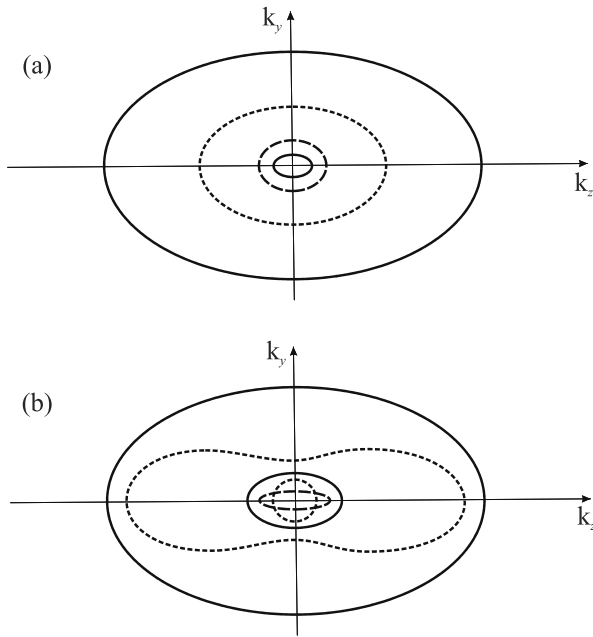


Рис. 1. Зависимость структуры сечения ПВВ EH -волны типа плоскостью падения $\mathbf{k} \in YZ$ (5) в АФМ пределе (6) для трех различных по отношению к $\omega_0\sqrt{1+\varepsilon}$ и ω_0 значений частоты ω : (а) – в (6) $D^{TM}(\omega, \mathbf{k}) = 0$; (б) – в (6) $D^{TE}(\omega, \mathbf{k}) = 0$. В обоих вариантах сплошная линия – $\omega > \omega_0\sqrt{1+\varepsilon}$, длинные штрихи – $\omega < \omega_0$, короткие штрихи – $\omega_0 < \omega < \omega_0\sqrt{1+\varepsilon}$

типов поляризации ЭМ волны такой эффект реализуется при одних и тех же сочетаниях $\omega - h$ включение даже предельной слабой гиротропии делает возможной реализацию в ФИМ среде (3)–(5) эффектов как трех-, и так и четырехволнового лучепреломления (отражения) ЭМ волны EH -типа. В качестве подтверждения достаточно учесть, что в окрестности точки магнитной компенсации ($|\mu_*| = |\varepsilon_*| = 0$) с точностью до величин второго порядка малости относительно $(\varepsilon_\perp \mu_* + \mu_\perp \varepsilon_*)^2 \Delta_+ \Delta_- \ll 1$ структура сечения ПВВ нормальных поляритонных волн в ФИМ (4)–(5) совпадает с (6). В этом пределе можно с помощью рис. 1, наглядно проследить характер зависимости от частоты структуры сечения плоскостью падения ПВВ нормальных поляритонных волн EH -типа (4)–(5). Для этого необходимо приведенные на рис. 1,

варианты (а) (волна TM -типа) и (б) (волна TE -типа) совместить в рамках общей системы координат ($\mathbf{k} \in YZ$). В частности, отсюда следует, что для падающей извне на слой ЭМ волны четырехволновое лучепреломление в рассматриваемой МОК становится возможным если одновременно $\omega > \omega_0\sqrt{1+\varepsilon}$, а $h < k_0\sqrt{\varepsilon_\perp}$, а двухволновое – если одновременно $\omega < \omega_0$, а $h < k_0\sqrt{(1+\varepsilon)\varepsilon_\perp}$.

Таким образом, учитывая вышесказанное и в соответствии с общими положениями теории волн в слоистых средах [20], для падающей из среды (1) на гиротропный слой с пространственной дисперсией среды (3)–(5) плоской объемной ЭМ волны TM -типа в случае продольной МОК ($\mathbf{q} \parallel OY$, $\tilde{\mathbf{c}} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel \mathbf{b} \parallel OZ$) получим ($\eta^2 \equiv -k_\parallel^2$, $h \equiv (\mathbf{k}\mathbf{b})$):

$$\tilde{H}_x(y = d) = (1 + V) \exp(i\psi),$$

$$\tilde{H}_x(y = -d) = W \exp(i\psi), \quad \psi = hz - \omega t, \quad (7)$$

$$H_x(-d < y < d) = \sum_{j=1}^{n=4} H_{xj} (A_j c_{jy} + B_j s_{jy}) \exp(i\psi),$$

$$c_{jy} = \text{ch}(\eta_j y), \quad s_{jy} \equiv \text{sh}(\eta_j y),$$

где A_j, B_j – произвольные постоянные, подлежащие определению, n – число корней $k_\parallel^2$ характеристического уравнения (4)–(5), j – номер ветви поляритонного спектра неограниченного магнетика, H_{xj} – амплитуда парциальной волны с номером j , входящей в состав волны H_x в магнетике (4)–(5). Учет наличия в ФИМ среде (3)–(5) неоднородного обменного взаимодействия, определяющего пространственную дисперсию среды, делает необходимым дополнение электромагнитных условий (2) соответствующими обменными граничными условиями [21]. С целью аналитического описания условий формирования ССК в рассматриваемой гиротропной магнитной среде, обладающей пространственной дисперсией, будем полагать, что межслоевые граничные условия (2) при $\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{k} \in YZ$, $\tilde{\mathbf{c}} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel \mathbf{b} \parallel OZ$ имеют вид

$$M_{1\alpha} = M_{2\alpha} = 0, \quad E_x = 0,$$

$$\tilde{E}_x = 0, \quad H_x = \tilde{H}_x, \quad E_z = \tilde{E}_z, \quad y = \pm d, \quad (8)$$

где $\alpha = x, y$. Соотношения (8) отвечают случаю, когда имеется единственный открытый канал фотонного излучения из ЛО ФИМ (3)–(5) в окружающую магнитный слой среду (1), связанный с волной TM -типа. По аналогии с методом расчета, развитым в [20], используя первые три соотношения из (8), можно в (7) исключить из дальнейшего рассмотрения

A_{2-4} и B_{2-4} , выразив их через A_1 и B_1 соответственно. Представляя структуру соответствующих соотношений как ($c_{jd} \equiv \text{ch}(\eta_j d)$, $s_{jd} \equiv \text{sh}(\eta_j d)$)

$$A_j = F_{j1} \frac{c_{1d}}{c_{jd}} A_1, \quad B_j = F_{j1} \frac{s_{1d}}{s_{jd}} B_1, \quad j = 1 \div 4, \quad F_{11} = 1, \quad (9)$$

получим, что для продольной МОК структуру матрицы перехода для слоя рассматриваемого ЛО ФИМ (3)–(5) с учетом (8)–(9) можно представить как

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Ha} \\ \mathbf{Eb} \end{pmatrix}_{y=d} = \bar{T}_p \begin{pmatrix} \mathbf{Ha} \\ \mathbf{Eb} \end{pmatrix}_{y=-d}, \quad \bar{T}_p \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\bar{T}_p(2d) \equiv \bar{P}(d) \bar{P}^{-1}(-d),$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Ha} \\ \mathbf{Eb} \end{pmatrix}_y = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix};$$

$$P_{11}(y) = H_{xj} F_{j1} \frac{c_{1d}}{c_{jd}}, \quad P_{12}(y) = H_{xy} F_{j1} \frac{s_{1d}}{s_{jd}} s_{1y}. \quad (11)$$

$$P_{21}(y) = E_{zj} F_{j1} \frac{c_{1d}}{c_{jd}} s_{1y}, \quad P_{22}(y) = E_{zj} F_{j1} \frac{s_{1d}}{s_{jd}} c_{1y}.$$

В результате, следуя [20], и используя (7), (9)–(11), получим, что для падающей из среды (1) на рассматриваемый слой плоской объемной ЭМ волны TM -типа коэффициент прохождения через нижнюю поверхность слоя ($y = -d$) и коэффициент отражения от его верхней поверхности ($y = d$) соответственно имеют вид:

$$W_p(y = -d) = \frac{2i\tilde{Z}_p(P_{11}P_{22} - P_{21}P_{21})}{(P_{21} - i\tilde{Z}_pP_{11})(P_{22} - i\tilde{Z}_pP_{12})}, \quad (12)$$

$$V_p(y = d) = \frac{i\tilde{Z}_p + Z_{\text{in}}}{i\tilde{Z}_p - Z_{\text{in}}}; \quad Z_{\text{in}} = \frac{T_{21} - iT_{22}\tilde{Z}_p}{T_{11} - iT_{12}\tilde{Z}_p}. \quad (13)$$

Таким образом, согласно (4)–(5), (8)–(13) обсуждаемая магнитная гетероструктура характеризуется селективной электромагнитной прозрачностью при сканировании не только по частоте, но и по углу. В частности если в (12) $P_{11}P_{12}\tilde{Z}_p^2 + P_{21}P_{22} = 0$, то $|W_p(y = -d)| = 1$, тогда как при $P_{11}P_{22} = P_{21}P_{21}$ $|W_p(y = -d)| = 0$ (см. также [20]). В соответствии с (11), (12) выполнение условия полного электромагнитной непрозрачности рассматриваемой открытой магнитной гетероструктуры ($|W_p(y = -d)| = 0$) имеет место в тех точках плоскости “ $\omega - g$ ” для которых совместно с (4)–(5)

$$(|c_{ad}| + |s_{\beta d}|)(|s_{ad}| + |c_{\beta d}|) = 0, \quad \eta_{\alpha,\beta}^2(\omega, h) < 0,$$

$$\alpha = 1 \div 4, \quad \beta = 1 \div 4, \quad \alpha \neq \beta, \quad (14)$$

что отвечает $|P_{11}| + |P_{12}| = 0$.

В окрестности каждого из указанных выше экстремумов форма кривой прозрачности в зависимости от ω или h подобна форме характерной для резонанса Брейта–Вигнера. Вместе с тем, согласно общим положениям теории волновых процессов в слоистых средах [20], дисперсионные свойства распространяющихся вдоль слоя (7) оптически прозрачного, гиротропного магнетика с пространственной дисперсией (3)–(5) EH -мод (как собственных ($\tilde{k}_{\parallel}^2 < 0$)), так и несобственных (радиационных ($\tilde{k}_{\parallel}^2 > 0$)) с учетом (10)–(13) определяются соотношением:

$$i\tilde{Z}_p(T_{11} + T_{22}) - T_{21} + T_{12}\tilde{Z}_p^2 = 0, \quad \tilde{Z}_p \equiv \frac{\tilde{k}_{\parallel}}{\tilde{\varepsilon}_e k_0}, \quad \tilde{k}_{\parallel}^2 \equiv \frac{\tilde{\varepsilon}_e}{\tilde{\varepsilon}_o} \{k_0^2 \tilde{\varepsilon}_o - h^2\}. \quad (15)$$

Важно отметить, что, вследствие (8), в рассматриваемой слоистой гетероструктуре имеется только один открытый канал фотонного рассеяния ($\tilde{k}_{\parallel}^2 > 0$), а в самой магнитной среде (4)–(5) возможно существование эффекта многолучевого отражения (преломления) для ЭМ волны распространяющейся вдоль магнитного слоя. Это, согласно [12], создает предпосылки для реализации в спектре излучения радиационных магнитных поляритонов ССК интерференционного типа по механизму Фридриха–Винтгена [13], однако в нашей модели интерференция в магнитном слое является более чем двухмодовой (в (7) $n > 2$).

Совместный анализ (3)–(12) показывает, что на плоскости внешних параметров “ $\omega - h$ ” условие формирования ССК интерференционного типа [12, 13] в спектре излучения распространяющихся вдоль слоя гиротропной среды объемных радиационных мод EH -типа, исходя из (10)–(12), (15), можно представить как:

$$(|P_{11}| + |P_{21}|)(|P_{12}| + |P_{22}|) = 0, \quad \tilde{k}_{\parallel}^2 > 0. \quad (16)$$

Таким образом, сочетание в рассматриваемой магнитной гетероструктуре только одного открытого канала фотонного излучения, с имеющим место в магнитной среде эффектом многоволновой интерференции, делает возможным при выполнении (16) слияние некоторых из отмеченных выше для $|W_p(y = -d)|$ точек максимума и минимума. В окрестности каждой из точек, определяемых из (16), структуру коэффициента прохождения (12) при угловом сканировании можно представить в виде ($C(h) - \text{const}$):

$$W_p(y = -d) \approx C \frac{h - h_0}{h - h' - ih''}. \quad (17)$$

В этом случае $|W_p(y = -d)|^2$ будет иметь форму, свойственную асимметричному резонансу (типа резонанса Фано [2]), а слияние максимума и минимума кривой $|W_p(y = \pm d)|^2$ отвечает коллапсу резонанса Фано, эффект который согласно [2] может сопутствовать формированию в самой точке “темного” состояния с нулевой радиационной шириной (16): $(|h - h'| + |h''| = 0)$.

В результате, в соответствии с (9)–(11), (16) формирование ССК интерференционного типа в открытом канале фотонного рассеяния ($\tilde{k}_{\parallel}^2 > 0$) в зависимости от числа парциальных волн в (7) $p \leq n = 4$, образующих такое “темное” состояние, становится возможным, если

$$\left(\sum_{j=1}^p |c_{jd}| \right) \left(\sum_{j=1}^p |s_{jd}| \right) = 0, \quad p = 2 \div 4, \quad \eta_j^2(\omega, h) < 0. \quad (18)$$

Таким образом, используя (4)–(5), для рассматриваемой продольной МОК условия существования в спектре радиационных магнитных EH -поляритонов ССК (18), индуцированных гибридизацией эффектов гиротропии и пространственной дисперсии на плоскости внешних параметров “ $\omega - h$ ” при $p = 2$, принимают вид:

$$\begin{aligned} D_{\nu}^{EH}(h, \omega) &= D_{\rho}^{EH}(h, \omega), \\ \nu \neq \rho, \quad \nu &= 1, 2, \dots, \quad \rho = 1, 2, \dots \quad \tilde{k}_{\parallel}^2 > 0. \end{aligned} \quad (19)$$

$\mathbf{q} \parallel OY, \quad \mathbf{b} \parallel OZ,$

При этом в (19) одновременно либо $\kappa_{\nu} \equiv \pi(2\nu - 1)/(2d)$ и $\kappa_{\rho} \equiv \pi(2\rho - 1)/(2d)$ или $\kappa_{\nu} \equiv \nu\pi/d$ и $\kappa_{\rho} \equiv \pi\rho/d$. Соотношения (4)–(5), (19) отвечают точкам вырождения в спектре объемных магнитных поляритонов EH -типа, распространяющихся вдоль слоя ЛО ФИМ (3)–(5), на обеих поверхностях которого при $\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{k} \in YZ$, $\mathbf{b} \parallel OZ$, $\mathbf{l}_0 \parallel OZ$ межслоевые (при $y = \pm d$) граничные условия имеют вид: $E_x = 0$, $H_x = 0$, где $M_{1\alpha} = M_{2\alpha} = 0$, $\alpha = x, y$. Несложно убедиться в наличии в рассматриваемой динамической системе двух независимых механизмов формирования “темных” состояний с нулевым радиационным затуханием в спектре излучательных поляритонов рассматриваемой магнитной гетероструктуры: пространственной дисперсии и гиротропии. Так из совместного анализа (5), (19) следует, что определяемое (19) условие формирования ССК с $p = 2$ сохраняется как в пределе $(|\alpha_1| + |\alpha_2|) \rightarrow 0$ (гиротропный $(|\varepsilon_*| + |\mu_*|) \neq 0$) диэлектрик без пространственной дисперсии (безобменное приближение), так

и в случае $(|\varepsilon_*| + |\mu_*|) \rightarrow 0$ (негиротропный магнитный диэлектрик с пространственной дисперсией $(|\alpha_1| + |\alpha_2|) \neq 0$). Помимо этого, согласно (5), (19), на плоскости внешних параметров “ $\omega - h$ ” возможны также и дополнительные точки формирования ССК с $p = 2$ (как результат гибридизации обоих отмеченных выше механизмов: гиротропии и пространственной дисперсии). В частности соотношения (5), (18), (19) могут выполняться и в условиях одновременного формального предельного перехода к пределу $(|\varepsilon_*| + |\mu_*|)\alpha_1 \neq 0$, $\alpha_2 \rightarrow 0$ или $(|\varepsilon_*| + |\mu_*|)\alpha_2 \neq 0$, $\alpha_1 \rightarrow 0$, т.е. в случае гибридизации в магнитной среде эффектов гиротропии и пространственной дисперсии.

Следует отметить, что и условия (14) полной ЭМ непрозрачности рассматриваемой магнитной гетероструктуры по отношению к падающей извне плоской объемной ТМ волне ($W_p = 0$) на плоскости внешних параметров “ $\omega - h$ ” также могут быть определены с помощью соотношений (19), только теперь в них одновременно должно быть либо $\kappa_{\nu} \equiv \pi(2\nu - 1)/(2d)$ и $\kappa_{\rho} \equiv \pi\rho/d$ или $\kappa_{\nu} \equiv \nu\pi/d$ и $\kappa_{\rho} \equiv \pi(2\rho - 1)/(2d)$ (в обоих этих вариантах $\nu = 1, 2, \dots$, $\rho = 1, 2, \dots$ ($\nu \neq \rho$)).

Совместный анализ соотношений (12)–(19) показывает, что для ССК интерференционного (16), (18), (19) типа с $p = 2 < n$, в условиях коллапса резонанса Фано, в (12)–(13) деструктивная интерференция поля излучения в открытом канале фотонного рассеяния ($\tilde{k}_{\parallel}^2 > 0$), вследствие гибридизации эффектов гиротропии и пространственной дисперсии, приводит к подавлению, отмеченного в [2], эффекта полной ЭМ прозрачности и теперь $|W_p(y = \pm d)| < 1$. Это связано с многоволновой интерференцией ЭМ волн EH -типа внутри ФИМ слоя, индуцированной гибридизацией эффектов гиротропии и неоднородного обменного взаимодействия (в (7) $n = 4$). В этом случае падающая извне на магнитный слой плоская объемная ЭМ волна ТМ-типа, ω и h которой отвечают формированию ССК (16), (18), (19), с поляризацией EH -типа и $p = 2 < n$, одновременно нерезонансно возбуждает в слое также и излучательную поляритонную моду той же поляризации (но с иным пространственным распределением ЭМ полей в слое). В частности, при $p = 2 < n$, для ССК $|P_{21}| = |P_{11}| = 0$ из (16) соответствующей излучательной моде согласно (12), (15), (16) отвечает $|P_{22}||P_{12}| \neq 0$, тогда как в случае ССК с $|P_{22}| = |P_{12}| = 0$ из (16) для одновременно возбуждаемой в рассматриваемом магнитном слое радиационной поляритонной моды $|P_{21}||P_{11}| \neq 0$. При этом, число парциальных волн участвующих в формировании в слое таких, “сопутствующих” образованию ССК с $p < n$, излучатель-

ных поляритонных мод, с учетом (7), определяется как $n - p$.

Как уже говорилось выше, физической причиной формирования интерференционных типов ССК с $p = 2 < n = 4$ является существование в магнитной среде (3)–(5) при $\omega - h$ удовлетворяющих (16), (18), (19) эффекта двулучеотражения при однократном падении объемной поляритонной волны на поверхность магнетика. Вместе с тем, согласно (16), (18), (19), для тех сочетаний $\omega - h$ которым в (4)–(5) отвечает возможность существования в гиротропной среде с пространственной дисперсией эффекта трех- (в (4)–(5), $\eta_{\alpha,\beta,\gamma}^2(\omega, h) < 0$ ($\alpha = 1 \div 4$, $\beta = 1 \div 4$, $\gamma = 1 \div 4$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$)) или четырехлучевого (в (4)–(5) $\eta_{1-4}^2(\omega, h) < 0$) отражения гибридной поляритонной волны от поверхности магнетика, делает принципиально возможным также и формирование в спектре излучения рассматриваемых радиационных магнитных поляритонов EH -типа интерференционных типов ССК (18) с $p = 3$ или $p = 4$ соответственно.

С учетом (19) их можно рассматривать как результат слияния на плоскости внешних параметров $\omega - h$ ССК интерференционного типа с $p = 2$ (см. (16), (18)). При этом у ССК с $p = 4$ согласно (16), (18), в отличие от ССК с $p = 2$ или $p = 3$ имеет место $p = n$. В результате в (12) $|W_p(y = -d)| = 1$, так как в (10)–(11) матрица перехода волны TM -типа через рассматриваемую гетероструктуру $\bar{T}$ при выполнении (18) становится единичной, а значит такие интерференционные ССК даже при многоволновой интерференции не будут “скрытыми” в рассматриваемой модели. В этом случае для ССК с $p = 4$ одновременно возбуждаемой в точке коллапса резонанса Фано “сопутствующей” излучательной поляритонной моды не существует ($p = n$). Однако, как уже отмечалось и в [17] для случая электронных волн в квантово-механическом волноводе, трудности достижения условий необходимых для существования ССК (18), возрастают с увеличением числа парциальных волн p , формирующих рассматриваемый тип ССК. В частности, для $p = 4$ согласно (16), (18) будет необходимо одновременное вырождение в одной и той же точке плоскости $\omega - h$ уже не двух, как в (18), (19) при ССК с $p = 2$, а четырех мод спектра объемных ЭМ волн EH -типа, распространяющихся вдоль слоя (8) гиротропного магнетика с пространственной дисперсией (4)–(5).

Несомненный практический интерес представляет то обстоятельство, что при $p = 2 \div n$ для падающей извне плоской объемной ЭМ волны (выше как пример волна TM -типа) в окрестности точки коллапса резонанс Фано (16), (18), (19) согласно (13)

$V_p = |V_p| \exp(i\varphi)$, $\operatorname{tg}(\varphi/2) = (h - h_N)/(h - h_D)$ и при строгом выполнении (16), (18), (19) $h_N = h_D$. Таким образом, если падающая извне ЭМ волна не плоская, а квазиплоская, то, поскольку пространственное смещение отраженного пучка вдоль границы раздела сред (эффект Гуса–Хенхен) определяется как $\Delta = \partial\varphi/\partial h$ (см., например, [20]), то $|\Delta(\omega, h)|$ достигает локального максимума как при $h = h_D$, так и при $h = h_N$. Его величина (в рамках данной модели расчета) неограниченно возрастает по мере приближения параметров падающей волны к отвечающим точке формирования “темного” поляритонного состояния с нулевой радиационной шириной (16), (18), (19).

Дополнительные особенности, связанные с возможностью формирования в спектре радиационных магнитных поляритонов “скрытых” ССК ($|W| < 1$) возникают в случае, когда обсуждаемая слоистая магнитная гетероструктура с одним открытым каналом фотонного рассеяния (4)–(8) является элементарным периодом одномерного магнитного фотонного кристалла ФК (1D МФК). Пусть в рассматриваемой продольной МОК ($\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{k} \in YZ$, $\mathbf{b} \parallel OZ$, $\mathbf{l}_0 \parallel OZ$) для 1D МФК из N -периодов в погруженного в среду (1) ($|y| > (2N - 1)d$) выполнена следующая система межслоевых граничных условий ($f = 1 \div N$, $\alpha = x, y$):

$$E_x = 0, \quad \tilde{E}_x = 0, \quad H_x = \tilde{H}_x, \quad E_z = \tilde{E}_z,$$

$$M_{1\alpha} = M_{2\alpha} = 0, \quad y = \pm(2f - 1)d. \quad (20)$$

С учетом (10)–(11) связь между коэффициентами отражения для падающей из среды (1) плоской объемной ЭМ волны TM -типа в случае слоя (13) и рассматриваемого типа конечного 1D МФК (V_{pN}) имеет вид (см. также [22]):

$$V_{pN} = \frac{V_p U_{N-1}(2Kd)}{U_{N-1}(2Kd) - W_p U_{N-2}(2Kd)};$$

$$U_{N-1}(x) \equiv \frac{\sin(Nx)}{\sin(x)}, \quad \cos(2Kd) = 0.5(T_{11} + T_{22}). \quad (21)$$

Прежде всего, отметим, что в такой магнитной гетероструктуре при выполнении (14) ($|V_p| = 1$) становится возможным эффект сверхизлучения радиационных магнитных поляритонов, если $U_{N-1}(2Kd) = (-1)^{N-1}N$. В этом случае N -кратно усилена величина радиационного затухания, формирующейся в МФК (20)–(21) коллективной излучательной поляритонной моды, по сравнению с рассмотренным выше случаем уединенного слоя гиротропного магнетика с пространственной дисперсией. Однако гибридизации эффектов пространственной дисперсии и гиро-

тропии в магнитной среде приводит и к дополнительному механизму формирования эффекта сверхизлучения радиационных магнитных поляритонов.

Расчет показывает, что если у падающей извне плоской объемной ЭМ волны TM -типа сочетание ω и угла падения таково, что согласно (16), (18), (19) отвечает формированию “скрытых” ССК с $p = 2 < n$, а

$$|s_{\alpha d}| + |s_{\beta d}| = 0, \quad \eta_{\alpha, \beta}^2(\omega, h) < 0, \\ \alpha = 1 \div 4, \quad \beta = 1 \div 4, \quad \alpha \neq \beta, \quad (22)$$

то одновременно нерезонансно возбуждаемая в этом случае в слое излучательная поляритонная мода для N -периодного ФК рассматриваемого типа (20), (21) также становится “сверхизлучательной”. Это связано с тем, что, по сравнению с уединенным слоем $N = 1$, при выполнении (21)–(22) N -кратно усилены как величина радиационного затухания, так и числитель коэффициента отражения V_{pN} для нерезонансно возбуждаемой на частоте “скрытого” ССК коллективной излучательной поляритонной моды рассматриваемого N -периодного магнитного ФК. В результате, несмотря на выполнение (16), (18), (19) с ростом числа периодов в рассматриваемом 1D МФК N в (21) $|V_{pN}| \rightarrow 1$, если речь идет об ССК с $p < n$ (тогда как для ССК с $p = n$ и выполнении (16), (18), (19) в этом же пределе $|V_{pN}| = |V_p| = 0$). Эффект сверхизлучательности сохраняется и в АФМ пределе (6) для радиационной поляритонной моды, сопровождающей формирование ССК симметрично защищенно-го типа.

Таким образом, в условиях гибридизации двух механизмов формирования эффекта коллапса резонансов Фано в спектре излучательных поляритонов: гиротропии и пространственной дисперсии вследствие многоволновой интерференции возможен только интерференционный тип ССК (16), (18), (19), но при $p < n$ его реализация не сопровождается полной электромагнитной прозрачностью рассматриваемой магнитной гетероструктуры (в отличие от случая $p = n$, изученного в [2]). При этом одновременно нерезонансно возбуждаемая в слое с одним открытым каналом фотонного излучения излучательная поляритонная мода становится “сверхизлучательной” если такой слой – элементарный период одномерной конечной сверхрешетки.

Некоторые частотные и угловые характеристики электромагнитной прозрачности рассматриваемой магнитной гетероструктуры, обусловленные излучательными поляритонными модами слоя можно рассмотреть более конкретно, если воспользоваться существенным различием в величинах фазовых

скоростей фотонов (c) и магнонов (s) в неограниченной магнитной среде. Для простоты и наглядности расчетов ограничимся случаем (6)–(8), т.е. слоем негиротропного, оптически прозрачного магнитного диэлектрика с пространственной дисперсией. Пусть $\mathbf{q} \parallel OY$, $\mathbf{l}_0 \parallel \mathbf{b} \parallel OZ$, а поскольку в рассматриваемой модели магнитной среды (4)–(10) $c \gg s$, то в случае $2dk_0 \ll 1$ с хорошей степенью точности можно предположить, что граничное условие из (8) $H_x(y = \pm d) = \tilde{H}_x$ выполнено по всей толщине $2d$ слоя АФМ (6)–(8) в симметричном окружении (среда (1)). Для решения обменной граничной задачи можно воспользоваться подходами, развитыми в [21, 23]. В результате, усредняя уравнения Максвелла для волны TM -типа по толщине АФМ слоя и, следуя [21, 23], получим, что для падающей на такой слой извне плоской объемной волны TM -типа входящий в (13), (21) френелевский амплитудный коэффициент отражения V_p с учетом (8) имеет вид:

$$V_p(\omega, h, 2k_0d \ll 1) \cong -\frac{\delta_p}{2i\tilde{Z}_p + \delta_p}, \\ \delta_p \approx \frac{2d}{\varepsilon_{\parallel} k_0} \times \\ \times \left[\varepsilon_{\parallel} (1 + \varepsilon) k_0^2 - h^2 + \sum_{\nu=1} \frac{\varepsilon \varepsilon_{\parallel} \omega^2 k_0^2 (2\kappa_{\nu} d)^{-2}}{\omega_0^2 + c^2(h^2 + \kappa_{\nu}^2) - \omega^2} \right]. \quad (23)$$

Таким образом, индуцированный излучательными поляритонными модами, отклик рассматриваемой магнитной гетероструктуры на поле падающей извне плоской объемной ЭМ волны обладает резонансным характером как при угловом, так и частотном сканировании. Иными словами, в рамках сделанных приближений, полученный результат вполне коррелирует с результатами, полученными ранее, в рамках дискретной модели для системы связанных классических осцилляторов во внешнем поле, для качественного объяснения эффектов электромагнитно индуцированной прозрачности в открытых резонаторных системах с несколькими степенями свободы (см., например, [24]).

Расчет показывает, что все приведенные выше соотношения и выводы на их основе в целом остаются в силе также и для полярной МОК ($\tilde{\mathbf{c}} \parallel \mathbf{b} \parallel OY$, $\mathbf{q} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$). Если открытый канал излучения по-прежнему связан с волной TM -типа в среде (1), то в этом случае формирование как ССК интерференционного типа (16), (18), так и сопутствующих эффектов электромагнитной прозрачности становится возможным если вместо (8) на обеих поверхностях рассматриваемого однородно намагниченного

слоя ЛО ФИМ (3)–(5) выполнены граничные условия вида ($\alpha = x, y$):

$$\frac{\partial M_{1\alpha}}{\partial z} = \frac{\partial M_{2\alpha}}{\partial z} = 0, \quad E_x = 0, \quad \tilde{E}_x = 0, \\ H_x = \tilde{H}_x, \quad E_y = \tilde{E}_y, \quad z = \pm d. \quad (24)$$

В этом случае, в соответствии с выбранной полярной МОК, в полученных выше соотношениях (9)–(19) необходимо выполнить замены $y \leftrightarrow z$ и учесть, что теперь в спектре EH -волн распространяющихся в магнитном слое (4)–(5), (22) в (19) $k_y = h$, $k_z = \kappa_\nu$. В частности, при такой замене соотношения (4)–(5), (19) будут по-прежнему определять точки вырождения в спектре объемных магнитных поляритонов EH -типа, распространяющихся вдоль слоя ЛО ФИМ (3)–(5), но теперь граничные условия на его поверхности (при $z = \pm d$) имеют вид: $E_x = 0$, $E_y = 0$, $\partial M_{1\alpha}/\partial z = \partial M_{2\alpha}/\partial z = 0$ ($\alpha = x, y$), так как в этой МОК $\mathbf{q} \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{b} \parallel OY$.

Таким образом, как в полярной, так и в продольной МОК одновременный учет в гиротропной среде, также и эффектов пространственной дисперсии может приводить к более чем двулучевому отражению (преломлению) ЭМ волны на границе раздела гиротропной и негиротропной сред, а значит, и к многоволновой интерференции для бегущей вдоль гиротропного магнитного слоя объемной ЭМ волны EH -типа. В этом случае имеет место сосуществование в магнитном слое двух механизмов формирования “темных” состояний в спектре излучения распространяющихся радиационных магнитных поляритонов: пространственной дисперсии и гиротропии. Неполная ЭМ прозрачность слоя с одним открытым каналом излучения возникает при условии, что число парциальных волн, участвующих в формировании ССК, не совпадает с полным числом парциальных волн той же симметрии, возникающих в магнитном слое при однократном внутрислоевом отражении от его поверхности. В результате на фоне многоволновой интерференции, в точках отвечающих коллапсу резонанса Фано, для мод, участвующих в формировании ССК, деструктивная интерференция приводит к одновременному полному подавлению связи этих мод как с открытым каналом излучения, так и с остальными парциальными волнами, не участвующими в формировании “темного” состояния, но по-прежнему связанными с открытым каналом излучения. Эти оставшиеся парциальные волны и дают в условиях коллапса резонанса Фано неполное прохождение для ЭМ волны, падающей извне на оптически прозрачный слой гиротропной среды с простран-

ственной дисперсией (соответствующее “темное” состояние (ССК) становится в результате “скрытым”). Если рассматриваемый слой оптически прозрачного гиротропного магнитного диэлектрика с пространственной дисперсией между двух идентичных анизотропно проводящих металловых поверхностей является элементарным периодом конечной одномерной сверхрешетки, то в этих же условиях отмеченная радиационная мода поляритонного спектра магнитного слоя становится сверхизлучательной. Эффект сверхизлучательности может сохраняться и в точке магнитной компенсации для радиационной поляритонной моды, сопровождающей формирование ССК симметрично защищенного типа. И в том, и в другом случае, это следствие конструктивной интерференции в открытом канале рассеяния тех фотонов, которые в условиях формирования ССК излучаются радиационными поляритонными модами каждого из магнитных слоев, образующих рассматриваемый конечный фотонный кристалл. В результате в поляритонном спектре каждого из элементарных периодов фотонного кристалла формируется “темное” состояние, однако электромагнитная прозрачность данной магнитной гетероструктуры с ростом числа этих элементарных периодов становится практически нулевой.

Финансирование работы. Исследование роли гибридизации эффектов пространственной дисперсии и гиротропии на электромагнитную прозрачность слоя с одним открытым каналом фотонного рассеяния выполнено при поддержке Минобрнауки РФ за счет государственного задания ФГБНУ “Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина” бюджетная тема. Исследование на примере конечной одномерной сверхрешетки возможности существования в этих условиях случаев дополнительных механизмов формирования сверхизлучательных мод выполнено при поддержке РФФИ, грант номер 20-19-00745-П.

Конфликт интересов. Авторы декларируют отсутствие конфликта интересов при выполнении данной работы.

1. S. Maekawa, T. Kikkawa, H. Chudo, J. Ieda, and E. Saitoh, JAP **133**, 020902 (2023).
2. Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, Ю. С. Джо, Р. М. Косби, ЖЭТФ **116**, 263 (1999).
3. К. Л. Кошелев, З. Ф. Садриева, А. А. Щербаков, Ю. С. Кившарь, А. А. Богданов, УФН **193**, 528 (2023).
4. J. Gomis-Bresco, D. Artigas, and L. Torner, Nature Photon. **11**, 232 (2017).
5. T. Ma, Q. Huang, H. He, Y. Zhao, X. Lin, and Y. Lu, Opt. Express **27**, 16624 (2019).

6. B. Flebus, S. M. Rezende, D. Grundler, and A. Barman, J. Appl. Phys. **133**, 160401 (2023).
7. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Rev. Mod. Phys. **90**, 015005 (2018).
8. B. A. Ivanov, Low Temp. Phys. **45**, 935 (2019).
9. В. В. Шевченко, *Плавные переходы в открытых волноводах. Введение в теорию*, Наука, М. (1969).
10. Г. Смоленский, В. Леманов, *Ферриты и их техническое применение*, Наука, Л. (1975).
11. С. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, Письма в ЖЭТФ **111**, 345 (2020).
12. H. Friedrich and D. Wintgen, Phys. Rev. A **32**, 3231 (1985).
13. S. I. Azzam and A. V. Kildishev, Adv. Opt. Mater. **9**, 2001469 (2021).
14. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов*, Наука, М. (1965).
15. D. O. Ignatyeva and V. I. Belotelov, Opt. Lett. **45**, 6422 (2020).
16. M. Rybin and Y. Kivshar, Nature **541**, 164 (2017).
17. Н. М. Шубин, В. В. Капаев, А. А. Горбачевич, Письма в ЖЭТФ **116**, 204 (2022).
18. В. И. Альшиц, В. Н. Любимов, А. Радович, ЖЭТФ **131**, 14 (2007).
19. Л. Г. Нарышкина, М. Е. Герценштейн, Изв. вузов. Радиофизика **10**, 91 (1967).
20. Л. М. Бреховских, *Волны в слоистых средах*, Изд-во АН СССР, М. (1957).
21. А. Г. Гуревич, *Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках*, Наука, М. (1973).
22. А. Ярив, П. Юх, *Оптические волны в кристаллах*, Мир, М. (1987).
23. Б. А. Калиникос, Изв. ВУЗов. Сер. Физика **24**, 42 (1981).
24. Z. Xu, Y. Wang, S. Liu, J. Ma, S. Fang, and H. Wu, IEEE Sens. J. **23**, 6378 (2023).

Дзета-регуляризация в эффекте разделения киральностей

З. В. Хайдуков¹⁾

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный Россия

Поступила в редакцию 21 марта 2024 г.

После переработки 8 апреля 2024 г.

Принята к публикации 9 апреля 2024 г.

Показано, что выражение для эффекта разделения киральностей может быть получено при помощи дзета-регуляризации, которая диктуется термодинамическим описанием системы.

DOI: 10.31857/S1234567824090118, EDN: AAJMZD

Введение. Предсказание существования семейства недиссипативных токов [1–7], возникающих во внешнем магнитном поле и в однородном поле вращения, вызвало значительный интерес в научном сообществе и привело к активным исследованиям в области недиссипативного транспорта [8, 9]. Эти явления получили общее название “киральных эффектов”. В данной работе мы в основном будем обсуждать киральный магнитный эффект [3] и эффект разделения киральностей [1, 2, 10]. Первый из них заключается в возникновении электрического тока j^V , направленного вдоль внешнего магнитного поля в присутствии кирального химического потенциала μ_A , второй – в возникновении аксиального тока j^A , направленного вдоль внешнего магнитного поля в присутствии обыкновенного химического потенциала μ_V . Оба эффекта в безмассовом случае могут быть записаны в виде:

$$\mathbf{j}^{A,V} = \frac{1}{2\pi^2} \mu_{V,A} \mathbf{B}. \quad (1)$$

Долгое время вопрос о необходимости корректной регуляризации для описания “киральных эффектов” оставался без внимания. Это мотивировалось тем, что вычисление токов проводилось в инфракрасной области, эффекты в основном были связаны с процессами на поверхности Ферми, и казалось очевидным, что влиянием ультрафиолетовой физики в этом случае можно пренебречь. Ошибочность такой аргументации была впервые продемонстрирована в рамках вычисления кирального магнитного эффекта на решетке и объяснена с точки зрения регуляризации Паули–Вилларса [11]. Дальнейшие исследования позволили объяснить результат, полученный в [11] с точки зрения решеточной регуляризации [12], и построить технику [13, 14], которая связала недиссипативный транспорт с топологическими инвариантами в

импульсном пространстве [15]. Однако, при применении этой техники к описанию эффекта разделения киральностей [14] в непрерывном пределе возникала неоднозначность, которая требовала введения регуляризации. В [14] вычисления были проделаны при помощи введения конечного шага решетки, что оставило открытым вопрос о непосредственном получении всех результатов в непрерывной теории.

Целью написания данной работы является описание регуляризации, которая помогает избежать вышеописанных проблем и позволяет применить все методы, полученные в рамках работ [12, 13] для описания киральных эффектов непосредственно в непрерывном пределе.

Необходимость регуляризации. Остановимся на проблемах, возникающих при описании эффекта разделения киральностей в непрерывной теории. В рамках построения формализма, который позволил бы связать выражение для аксиального тока с топологическими инвариантами в импульсном пространстве [14], было получено выражение для аксиального тока во внешнем калибровочном поле:

$$j_k^5 = -\frac{i}{2} T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} T r (\gamma^5 \mathcal{G}(\omega_n, \mathbf{p}) \partial_{p_i} \mathcal{G}^{-1}(\omega_n, \mathbf{p}) \partial_{p_j} \mathcal{G}(\omega_n, \mathbf{p}) \partial_{p_k} \mathcal{G}^{-1}(\omega_n, \mathbf{p})) F_{ij}. \quad (2)$$

В этой формуле $\mathcal{G}(\omega_n, \mathbf{p})$ – функция Грина в пространстве Евклида, которая вычисляется из функционального интеграла в соответствующей теории, $\mathcal{G}^{-1}(\omega_n, \mathbf{p})$ – обратная функция Грина, γ^μ – гамма матрицы Дирака. Подставим в это выражение пропагатор безмассовых невзаимодействующих фермионов:

$$\mathcal{G}^{-1}(\omega_n, \mathbf{p}) = -i\gamma^\mu p_\mu, p_\mu = (\mathbf{p}, \omega_n), \omega_n = 2\pi T \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3)$$

¹⁾e-mail: khaidukov.zv@phystech.edu

Пусть магнитное поле направлено вдоль оси z (т.е. $F_{12} = -B_z$), тогда выражение для аксиального тока принимает вид:

$$j_z^5 = -4Ti \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\omega_n}{((\omega_n)^2 + p^2)^2} B_z; \quad (4)$$

и после интегрирования по импульсам получаем:

$$j_z^5 = -\frac{Ti}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{sgn}(\omega_n) B_z. \quad (5)$$

Таким образом, формально, в случае безмассовых фермионов в отсутствии среды аксиальный ток равен сумме бесконечного числа единиц и минус единиц. Если в результате взаимодействия в среде $\mathcal{G}(\omega, \mathbf{p})$ изменится как $\omega_n \rightarrow f(\omega_n)$, $p_i \rightarrow g(p_i)$, то из формулы (2) следует, что результат будет зависеть от $\text{sgn } f(\omega_n)$.

При учете химического потенциала происходит замена $\omega_n \rightarrow \omega_n - i\mu$, и мы сталкиваемся с необходимостью аналитического продолжения функции знака на комплексную плоскость для получения выражения для тока. Эта проблема может быть решена при помощи введения решеточной регуляризации [14, 16], но в следующей части мы опишем метод, позволяющий получить все результаты непосредственно в непрерывной теории. Мы покажем, что окончательный ответ для тока будет совпадать с выражением, которое получается при первоначальном суммировании мацубаровских частот и последующем интегрировании по импульсам (1). Это означает, что формализм, развитый в работах [12–14, 16], может быть применен непосредственно для описания непрерывных теорий без необходимости введения решеточной регуляризации.

Использование дзета-функции. В случае отсутствия комплексных величин мы можем переписать функцию знак в (5) в виде:

$$\text{sgn}(\omega_n) = \lim_{\alpha \rightarrow -0} A \left(\sum_{n=0}^{\infty} (n+1/2)^{-\alpha} - \sum_{n=0}^{\infty} (n+1/2)^{-\alpha} \right);$$

$$A = (2\pi T)^{-\alpha}; \quad (6)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1/2)^{-\alpha} = \zeta_H(\alpha, 1/2), \quad (7)$$

в этом выражении $\zeta_H(\alpha, 1/2)$ означает дзета-функцию Гурвица [17], взятую в точке $(\alpha, 1/2)$. Подобная регуляризация сводит вычисление коэффициента в выражении для эффекта разделения киральностей к вычислению значения дзета-функции Гурвица или ее аналитического продолжения в

точке $(-0, 1/2)$. Первое предсказание в рамках такой регуляризации – отсутствие аксиального тока в отсутствии химического потенциала²⁾ с комплексным аргументом. Введем:

$$\zeta_H(\alpha, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} - i\frac{\mu}{2\pi T} \right)^{-\alpha}; \quad (8)$$

$$\zeta_H(\alpha, \bar{\eta}) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} + i\frac{\mu}{2\pi T} \right)^{-\alpha}; \quad (9)$$

$$\eta = \frac{1}{2} - i\frac{\mu}{2\pi T}, \quad (10)$$

с учетом этого выражение для аксиального тока можно переписать в виде:

$$j_z^5 = -\frac{Ti}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow -0} (2\pi T)^{-\alpha} (\zeta_H(\alpha, \eta) - \zeta_H(\alpha, \bar{\eta})) B_z. \quad (11)$$

Воспользуемся стандартной формулой для значения дзета-функции Гурвица в нуле:

$$\zeta_H(-0, \eta) = \frac{1}{2} - \eta, \quad (12)$$

Для аксиального тока мы получаем:

$$j_z^5 = \frac{\mu}{2\pi^2} B_z; \quad (13)$$

или в векторном виде:

$$\mathbf{j}^5 = \frac{\mu}{2\pi^2} \mathbf{B}. \quad (14)$$

Это выражение полностью совпадает с тем, которое получается при первоначальном суммировании мацубаровских частот и последующем интегрировании по импульсу (1). Подчеркнем, что в хорошо регуляризованных теориях суммирования и интегрирования должны быть перестановочны.

В верности предложенной нами регуляризации и формулы (11) можно убедиться еще из следующей аргументации: в работе [16] было предложено обобщение техники для поиска топологических инвариантов в импульсном пространстве в решеточной регуляризации на неоднородные среды [16], и получена формула для плотности аксиального тока в рамках теории линейного отклика, которая в случае обобщения на непрерывную теорию,³⁾ может быть записана как:

$$j_k^5(x) = -\frac{i}{2} \sum_n T \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \text{tr}(\gamma^5 I F_{ij}) \quad (15)$$

²⁾Мы также можем переписать (5) при помощи дзета-функции Римана, в этом нет ничего удивительного, так как $\zeta_H(\alpha, \beta)$ переходит в дзета-функцию Римана [18] при $\beta = 1$. В случае присутствия химического потенциала нам необходимо использовать дзета-функцию Гурвица [17]

³⁾Это может быть сделано по аналогии с [19].

$$I = (G_W^0 \star (\partial_{p_i} Q_W^0) \star G_W^0 \star (\partial_{p_j} Q_W^0) \star G_W^0) \partial_{p_k} Q_W^0. \quad (16)$$

Здесь G_W^0 - символ Вейля функции Грина, которая может описывать неоднородные системы, индекс "0" подчеркивает, что она вычисляется в невозмущенной по внешнему полю теории [16], под знаком " $\star$ " подразумевается оператор $\exp(\frac{i}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x))$, где стрелки обозначают направления действия соответствующих производных, а $Q_W \star G_W = 1$. Теперь найдем дивергенцию аксиального тока вдоль оси z , предполагая слабую неоднородность химического потенциала ($l^2 \partial_i \mu(\mathbf{x}) \ll 1$, здесь l - характерный масштаб системы). В этом случае в первом приближении можно опустить символ " $\star$ " в (16), тогда выражение для плотности аксиального тока в непрерывной теории можно записать:

$$j_z^{5\mu}(\mathbf{x}) = -4iT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\omega_n - i\mu(\mathbf{x})}{((\omega_n - i\mu(\mathbf{x}))^2 + p^2)^2} B_z.$$

Проведем интегрирование по импульсам и получим:

$$j_z^{5\mu}(\mathbf{x}) = -\frac{Ti}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow -0} A(\zeta_H(\alpha, \eta(\mathbf{x})) - \zeta_H(\alpha, \bar{\eta}(\mathbf{x}))) B^z.$$

В этом случае выражения для химического потенциала в (10) становятся зависящими от пространственных координат, коэффициент A задается формулой (6). Тогда выражение для дивергенции принимает вид:

$$\partial_z j^{5z} = \frac{Ti}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow -0} \alpha A W_z B^z; \quad (17)$$

$$W_z = \zeta_H(\alpha + 1, \eta(\mathbf{x})) \partial_z \eta(\mathbf{x}) - \zeta_H(\alpha + 1, \bar{\eta}(\mathbf{x})) \partial_z \bar{\eta}(\mathbf{x});$$

$$\partial_z \eta = -\frac{i}{2\pi T} \partial_z \mu(\mathbf{x}) \equiv \frac{i}{2\pi T} E_z(\mathbf{x}), \quad (18)$$

теперь нам необходимо воспользоваться формулой:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} (\zeta_H(\alpha + 1, \eta) - \frac{1}{\alpha}) = -\psi(\eta), \quad (19)$$

здесь $\psi(\eta)$ - дигамма-функция, которая при данном наборе параметров регулярна, что приводит к:

$$\partial_\mu j^{5\mu} \equiv \partial_z j^{5z} = \frac{iT}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow -0} \frac{iA}{\pi T} E_z B^z \alpha \left(\frac{1}{\alpha} + \dots \right), \quad (20)$$

где три точки обозначают регулярную часть. Значит, из выражения для эффекта разделения киральностей мы получили выражение для аксиальной аномалии, которое в векторном виде мы можем переписать как:

$$\partial_\mu j^{5\mu} = -\frac{1}{16\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\lambda\rho} F_{\mu\nu} F_{\lambda\rho}. \quad (21)$$

Дзета-регуляризация и термодинамика.⁴⁾

Может сложиться впечатление, что мы просто удачно "угадали" способ регуляризации в (11), однако, как мы сейчас покажем, этот способ диктуется термодинамическим описанием системы [18]. Вычисление статсуммы подразумевает нахождение дзета-функции для детерминанта оператора, входящего в нее. Для большей наглядности проделаем все вычисления для безмассовых фермионов, запишем:

$$Z = \tilde{C} \det(D), D = \prod_{\{P\}} (\det(P^2 \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4}))^{1/2}. \quad (22)$$

Здесь под P подразумевается квантовые числа всех возможных состояний, в которых могут находиться фермионы. Этот детерминант мы можем переписать в виде:

$$Z = \tilde{C} \prod_{\{P\}} (P^2)^2, \quad (23)$$

для нас самое важное, что такая форма (22) диктует способ введения дзета-регуляризации.

Пусть λ_n - собственное значение оператора D , тогда введем дзета-функцию согласно

$$\zeta(s) = \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda_n)^{-s}. \quad (24)$$

В нашем случае

$$\lambda_n = ((2\pi T(n + 1/2) + i\mu)^2 + k^2). \quad (25)$$

Запись выражения (24) носит символический характер, поскольку мы должны учесть плотность числа собственных значений, последняя в непрерывной теории задается в виде:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k, \quad (26)$$

с учетом вышеописанного, для вычисления $\det D$ нам необходимо найти

$$\det D = \exp \left(+2 \frac{d\zeta}{ds} \Big|_{s=0} \right), \quad (27)$$

учет константы $\tilde{C}$ в (23) приводит к

$$\ln Z = 2 \frac{d\zeta}{ds} \Big|_{s=0} + \tilde{C} \zeta(0). \quad (28)$$

⁴⁾ Само собой использование дзета-функции Гурвица не является чем-то новым с точки зрения описание термодинамики фермионных систем [20], но автора будет интересовать иллюстрация взаимосвязи между статсуммой и дзета-функцией детерминанта оператора в смысле, рассмотренном Хокингом [18].

Теперь мы можем приступить к вычислению дзета-функции для оператора (начнем со случая отсутствия химического потенциала):

$$\zeta(s) = \frac{8\pi V}{(2\pi)^3} \int k^2 dk \left(\sum_{n=0}^{\infty} ((2\pi(n+1/2))^2 + k^2)^{-s} \right). \quad (29)$$

Интегрируем по частям и получаем:

$$\begin{aligned} \zeta(s) = & -\frac{8\pi V}{(2\pi)^3} (2\pi T)^{3-2s} \zeta_H(2s-3, 1/2) \times \\ & \times (4-4s)^{-1} \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(s-3/2)}{\Gamma(s-1)}. \end{aligned} \quad (30)$$

При s , стремящемся к нулю, у гамма-функции Эйлера присутствует полюс, а это значит, что в (29) $\zeta(0) = 0$, но при этом

$$\zeta'(0) = -T^3 \frac{8\pi^2}{3} \zeta_H(-3, 1/2). \quad (31)$$

Для дзета-функции Гурвица мы можем использовать ее связь с полиномами Бернулли:

$$\zeta_H(-3, 1/2) = -\frac{B_4(1/2)}{4} = -\frac{7}{960}, \quad (32)$$

где $B_4(x)$ – четвертый многочлен Бернулли:

$$B_4(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}. \quad (33)$$

Собирая все вместе, получаем:

$$\ln Z/V = \frac{7\pi^2}{180} T^3. \quad (34)$$

Для того чтобы получить результат в случае присутствия химического потенциала, необходимо проделывать такие же вычисления, но с учетом того, что

$$2 \sum_{n=0}^{\infty} ((2\pi T(n+1/2))^2 + k^2)^{-s} \rightarrow I_1 + \bar{I}_1; \quad (35)$$

$$I_1 = \sum_{n=0}^{\infty} ((2\pi T(n+1/2) - i\mu)^2 + k^2)^{-s}; \quad (36)$$

$$\bar{I}_1 = \sum_{n=0}^{\infty} ((2\pi T(n+1/2) + i\mu)^2 + k^2)^{-s}. \quad (37)$$

В результате получаем:

$$\zeta'(0) = -T^3 \frac{8\pi^2}{6} (\zeta_H(-3, \eta) + \zeta_H(-3, \bar{\eta})), \quad (38)$$

что в итоге дает:

$$\ln \det D = \ln(Z)/V = \frac{7\pi^2}{180} T^3 + \frac{\mu^4}{12T\pi^2} + \frac{\mu^2 T}{6}. \quad (39)$$

Именно вычисление дзета-функции для детерминанта оператора D позволяет нам ввести корректную регуляризацию для выражения (11). Более того, из этого рассмотрения следует, что при работе с эффективными теориями можно со значительной уверенностью не вводить регуляторы для вычислений киральных эффектов в том случае, если возможно вычислить статсумму или, что то же самое, построить термодинамическое описание системы.

Закключение. Мы исследовали возможность использования дзета-регуляризации для вычисления аксиального тока в эффекте разделения киральностей. Было показано, что расходимость в выражении для аксиального тока может быть регуляризована с использованием дзета-функции Гурвица. В верности этой регуляризации и формулы (11) можно убедиться с помощью вычисления выражения для аксиальной аномалии, которая связана с вычетом в полюсе дзета-функции. Было показано, что такая регуляризация позволяет также получить полное термодинамическое описание системы и не требует каких-либо дополнительных предположений. Эти утверждения в безмассовом случае, в принципе, сводят вопрос о существовании киральных эффектов к вопросу о правильном нахождении термодинамического равновесия системы, поскольку позволяют правильно вычислить выражение для детерминанта оператора, входящего в выражение для статсуммы. Если последнее найдено корректно, то можно опустить введение регуляризации в выражение для токов, наподобие того, как мы опускаем введение ультрафиолетовой регуляризации при вычислении в рамках термальной теории поля.

Из всего вышеописанного следует, что формализм, рассмотренный в работах [12–14], без ограничений можно применять в случае непрерывной теории. В частности, можно будет легко обобщить результаты, полученные в рамках решеточной регуляризации, и показать отсутствие равновесного кирального магнитного эффекта как в непрерывной четырехмерной теории, так и его аналога в двух измерениях.⁵⁾ В безмассовом случае этот результат особенно интересен из-за противоречия между работами [6] и [11], в первой – рассматривается система с точной киральной симметрией, которая описывает экспериментальные наблюдения в тонких проволочках, в то время, как во второй – все результаты получены при помо-

⁵⁾ Для кирального магнитного эффекта требуется более строгий анализ ультрафиолетовых расходимостей в случае присутствия или отсутствия массового члена при термодинамическом описании системы [22].

щи решеточного моделирования, что приводит либо к отсутствию точной киральной симметрии, либо к проблеме дублеров [21]. Из рассмотренной в работе взаимосвязи между регуляризацией выражения для кирального эффекта и вычисления детерминанта оператора, который входит в статсумму, можно сделать предположение, что в случае рассмотрения системы с киральным химическим потенциалом первым существенным признаком отсутствия эффекта является невозможность построения обыкновенной термодинамики в следствии расходимостей. В случае аналога кирального магнитного эффекта в двух измерениях подобное рассмотрение действительно приводит к проблемам с построением термодинамики в регуляризации Паули–Вилларса [22].

Одним из существенных следствий рассмотренного нами метода является возможность изучения взаимосвязи между киральными эффектами и аномалиями, так как последние очень просто вычисляются в теориях с дзета-регуляризацией.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке гранта Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” # 22-1-3-59-1.

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии потенциального конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

1. M.A. Metlitski and A.R. Zhitnitsky, Phys. Rev. D **72**, 045011 (2006).
2. M. Pühr and P.V. Buividovich, Phys. Rev. Lett. **118**(19), 192003 (2017); arXiv: 1611.07263 [hep-lat].
3. K. Fukushima, D.E. Kharzeev, and H.J. Warringa, Phys. Rev. D **78**, 074033 (2008).
4. A. Vilenkin, Phys. Rev. D **21**, 2260 (1980).
5. A. Vilenkin, Phys. Rev. D **20**, 1807 (1979).
6. A. Alekseev, V. Cheianov, and J. Froehlich, Phys. Rev. Lett. **81**, 3503 (1998); arXiv:cond-mat/9803346.
7. K. Landsteiner, E. Megias, and F. Pena-Benitez, Lect. Notes Phys. **871**, 433 (2013); arXiv:1207.5808 [hep-th].
8. M.,N. Chernodub, A. Cortijo, A.G. Grushin, K. Landsteiner, and M.A. Vozmediano, Phys. Rev. B **89**, 081407(R) (2014); arXiv:1311.0878.
9. V.A. Miransky and I.A. Shovkovy, Phys. Rept. **576**, 1 (2015); arXiv:1503.00732 [hep-ph].
10. Z.V. Khaidukov, JETP Lett. **117**, 721 (2023).
11. P.V. Buividovich, Nucl. Phys. A **925**, 218 (2014); arxiv:1312.1843 [hep-lat].
12. M.A. Zubkov Phys. Rev. D **93**(10), 105036 (2016); arXiv:1605.08724 [hep-ph].
13. M.A. Zubkov, Ann. Phys. **373**, 298 (2016); arXiv:1603.03665 [cond-mat.mes-hall].
14. Z.V. Khaidukov and M.A. Zubkov, Phys. Rev. D **95**, 074502 (2017); arXiv: 1701.03368.
15. G.E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
16. M. Suleymanov and M.A. Zubkov, Phys. Rev. D **102**, 076019 (2020).
17. T.M. Apostol, *Introduction to analytic number theory, Undergraduate Texts in Mathematics*, Springer-Verlag, N.Y., Heidelberg (1976).
18. S.W. Hawking, Commun. Math. Phys. **55**, 133 (1977).
19. J. Varynen, The gradient expansion and topological insulators (2011); https://helka.helsinki.fi/permalink/358UOH_I NST/11k3puc/alma9922688853506253.
20. M. Laine and A. Vuorinen, Lect. Notes Phys. **925**, 1 (2016).
21. H.B. Nielsen and M. Ninomiya, Phys. Lett. B. **105**(2–3), 219 (2016).
22. Z.V. Khaidukov, JETP Lett. **116**, 754 (2022); DOI 10.1134/S0021364022602366.

Discrete anisotropy model of heterogeneous cardiac tissue predicting the occurrence of symmetry breaking of reentrant activity

S. A. Romanova^{†*}, A. K. Berezhnoy^{†*×}, L. E. Ruppel[†], A. A. Aitova^{†*}, S. S. Bakumenko^{†×}, I. S. Semidetnov[†], V. D. Naumov[†], M. M. Slotvitsky^{†*×}, V. A. Tsvelaya^{†*×}1), K. I. Agladze^{†*×}1)

[†]Laboratory of Experimental and Cellular Medicine, Moscow Institute of Physics and Technology, 141701 Dolgoprudny, Russia

^{*}M. F. Vladimirsky Moscow Regional Research Clinical Institute, 129110 Moscow, Russia

[×]ITMO University, 197101 St. Petersburg, Russia

Submitted 20 March 2024

Resubmitted 20 March 2024

Accepted 4 April 2024

DOI: 10.31857/S123456782409012X, EDN: ALSOWB

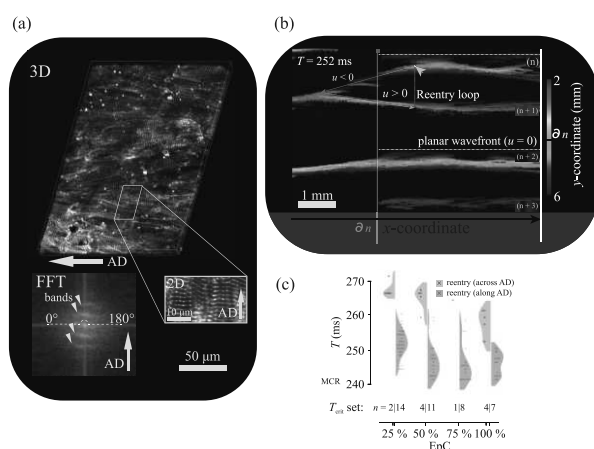


Fig. 1. (Color online) (a) – Confocal micrographs of a section of anisotropic tissue, Fast Fourier transformation of the pattern of transverse banding of the actinin cytoskeleton. AD is shown as white arrow. (b) – Spatio-temporal graphs of the movement of the leading wave front during the formation of reentry in a high-frequency wave train. Here, the spatial x -coordinate is plotted along the horizontal axis, the y -coordinate is displayed through color-coding, and time is plotted along the vertical axis (from top to bottom), u denotes the projection of the CV onto the x -axis. Semi-translucent white arrows and a vertical dotted line show the closure of the reentry loop for wave (n). The ($n + 1$) wave annihilates with the resulting spiral wave. (c) – Dotted and violin plots showing the distribution of T_{crit} at different values of EpC and different orientation of AD in the samples

Cardiac arrhythmias are a major cause of cardiovascular mortality worldwide. Coordinated and efficient functioning of cardiac tissue is possible due to the sequential transmission of electrical excitation between cardiomyocytes, the working cells of the heart. This

transfer of excitation is carried out by intercellular connections of different biological nature – their variability presumably determines the anisotropy of the conduction velocity (CV) of the excitation waves [1]. Cardiac tissue displays significant heterogeneity in excitation conduction, with functional blocks and reentrant arrhythmia sources emerging from the inhomogeneities in conduction, challenging the assumptions held by conventional homogeneous models [2]. Our aim in this study was to create a computational model of cardiac tissue that will allow us to take into account the role of intercellular connections in the desynchronization of cardiac excitation.

For this purpose, two models of cardiac tissue were involved in the study – a two-component computational model (*in silico model*) and an experimental model based on a cellular culture of neonatal rat cardiomyocytes (*in vitro model*). The computational model consisted of the Cellular Potts Model (CPM), used for the biologically correct distribution of intercellular contacts [3] and the electrophysiological Courtemanche model, which describes the generation and propagation of electrical excitation [4]. Two types of intercellular conduction were introduced in the computational model: gap junctional and ephaptic intercellular coupling. Both in *in vitro* and *in silico* model, the anisotropy direction (AD) was specified in the samples, i.e. orientation of fibers in cardiac tissue. In both cases, samples of the same size (up to 15 mm) were created with a non-conducting geometric obstacle having a non-flux boundary. To visualize the excitation wave train in the experimental samples, the fast calcium-dependent fluorescent label Fluo4-AM was used.

We investigated the conditions under which reentrant spiral waves can be generated by a high-frequency planar wavetrain in the vicinity of a rectangular geo-

¹⁾e-mail: valeriyatsvelaya@gmail.com; agladze@yahoo.com

metrical obstacle. The key idea is that the combination of a rectangular non-conducting obstacle with a global anisotropy direction aligned with one of its sides makes it possible to maintain the symmetry of the obstacle's tip both when AD or anisotropy ratio (AR) are changed (where AR is the ratio of CV along AD and across). We formalized the influence on tissue arrhythmogenicity through a relative change in the vulnerable frequency corridor: a set of values of the stimulation period T_{crit} at which reentry formation is possible.

We defined that the set of T_{crit} shifts and expands when AD is rotated, while the spiral wave circulation period and the maximum captured rate (MCR) remain unchanged. The experimental model showed qualitative consistency with computational results in terms of T_{crit} distribution. At the same time, both models refute the assessment of changes in T_{crit} made using eikonal equation with homogeneous approximation, which indicates the limit of applicability of the homogeneous models when describing the occurrence of primary reentry. Figure 1a shows the alignment of actinin cytoskeleton structures in a monolayer of rat cardiomyocytes; a similar organization of intracellular structures was achieved in our computational model. Figure 1b shows a spatiotemporal sweep depicting the propagation of the leading edge of the excitation wave during the formation of reentry. Figure 1c shows the model-predicted shift in T_{crit} values, which was confirmed in a tissue culture experiment.

We have further studied the dependence of arrhythmogenicity on the mechanism of cellular coupling: we found that ephaptic type of conductance (EpC) directly controls the spread of T_{crit} . These results could be useful for explanation of cases where non-selective modulation of ion channels can synergize with changes in EpC.

As a result, we derived a theoretical formulation of CV anisotropy and validated it through *in vitro* and *in silico* functional experiments as an effective tool for predicting primal reentry. Joint theoretical and experimental analysis of the relationship between the cardiac tissue structure and its function revealed two aspects. The first one consisted in limitation of the applicability of the homogeneous formulation of conduc-

tion anisotropy when studying primary reentry, since the nature of intercellular heterogeneities plays a crucial role in the sustainable growth of a unidirectional block. The second one showed up in the distinct role of gap junctional and ephaptic coupling in stabilizing the high-frequency wavetrain, which modulates tissue arrhythmogenicity bypassing the well-known factors such as modulation of ionic currents.

Funding. The work was supported by the Russian Science Foundation (Research Grant # 23-74-01028).

Conflicts of interest. The authors declare no conflict of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses, or interpretation of data; in the writing of the manuscript; or in the decision to publish the results.

Ethics approval and consent to participate. All the experimental studies conformed to the Guide for the Care and Use of Laboratory Animals published by the United States National Institutes of Health (Publication # 85-23, revised 1996) and approved by the Moscow Institute of Physics and Technology Life Science Center Provisional Animal Care and Research Procedures Committee, Protocol # A2-2012-09-02.

This is an excerpt of the article "Discrete anisotropy model of heterogeneous cardiac tissue predicting the occurrence of symmetry breaking of reentrant activity". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600782

1. A. G. Kléber and R. Yoram, *Physiol. Rev.* **84**(2), 431 (2004).
2. D. N. Hajian, F. Parastesh, S. Jafari, M. Perc, and E. Klemencic, *Chaos, Solitons & Fractals* **179**, 114413 (2024).
3. G. Francois and J. A. Glazier, *Phys. Rev. Lett.* **69**(13), 2013 (1992).
4. M. Courtemanche, R. J. Ramirez, and S. Nattel, *Am. J. Physiol. Heart Circ. Physiol.* **275**(1), H301 (1998).
5. N. Kudryashova, A. Nizamieva, V. Tsvelaya, A. V. Panfilov, and K. I. Agladze, *PLOS Comput. Biol.* **15**(3), e1006597 (2019).
6. V. N. Kachalov, V. A. Tsvelaya, N. N. Kudryashova, and K. I. Agladze, *JETP Lett.* **106**, 608 (2017).

Исключительные точки в тримерах диэлектрических цилиндров

А. А. Дмитриев⁺¹⁾, К. В. Барышникова⁺, М. В. Рыбин^{+*}

⁺ Физико-технический мегафакультет, университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

^{*} Физико-технический институт им. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 11 марта 2024 г.

После переработки 3 апреля 2024 г.

Принята к публикации 3 апреля 2024 г.

При помощи теории многоволнового рассеяния исследованы собственные моды в тримере из бесконечных цилиндров в форме равностороннего и равнобедренных треугольников. Получены уравнения на собственные частоты исключительных точек, в которых происходит вырождение собственных частот и собственных векторов. Симметрия равнобедренного треугольника обуславливает отделение мод, антисимметричных вдоль направления основания. В случае, когда треугольник равносторонний, моды распадаются на симметричные и дважды вырожденные вращательные моды. Обнаружено, что затухающие симметричные моды в тримере имеют большую добротность по сравнению с димером, что имеет значение для практических применений эффектов на основе исключительных точек. Также было исследовано поведение комплексных собственных частот в тримере в форме равнобедренного треугольника в зависимости от соотношения длин основания и боковой стороны. В точке, соответствующей равностороннему треугольнику, добротность симметричных мод имеет локальный максимум, а антисимметричных – локальный минимум.

DOI: 10.31857/S1234567824090131, EDN: BQHIGN

В последнее время, оптика систем с усилением и потерями стала одним из приоритетных направлений в нанофотонике [1–4]. Собственные частоты таких систем описываются неэрмитовыми гамильтонианами, а собственные моды не являются в общем случае ортогональными. В предельном случае, который достигается в так называемых исключительных точках (ЕР), гамильтониан не может быть диагонализирован (соответствующая матрица становится дефектной), что проявляется в вырождении собственных частот, а собственные векторы при этом становятся параллельными. Такое вырождение приводит к множеству оптических эффектов, таких как однонаправленная передача света без отражения [5, 6], нарушение взаимности [7] и расщепление собственных частот по корневому закону при снятии вырождения [8].

В фотонике исключительные точки обычно изучаются в контексте систем с симметрией четность–время (PT). В этом случае они соответствуют условиям перехода к режиму разрушения симметрии, в котором вместо двух вещественных частот появляются две комплексно сопряженные. Однако наличие в системе симметрии четность–время вовсе не является обязательным условием существования исключительных точек. Среди них – плазмон-

ные волноводы на основе структур диэлектрик–металл–диэлектрик [9], периодические массивы цилиндров [10], квадрумер из кремниевых дисков [11], асимметричный димер диэлектрических цилиндров без потерь [12], а также отдельные частицы в форме гантели [13], сфероида [14] и конуса [15].

Помимо этого, было обнаружено возникновение исключительных точек в симметричных димерах диэлектрических бесконечных цилиндров [16] и сфер [17] одинакового радиуса, выполненных из одного и того же материала без потерь. Установлено, что появление этих исключительных точек связано с наличием зависимости коэффициента связи между частицами от частоты [17].

Цель настоящего исследования состоит в исследовании возможности увеличения добротности мод исключительных точек за счет понижения симметрии, что имеет важное прикладное значение. В качестве объекта с более низкой, чем у димера, симметрией, рассматривается тример в форме равнобедренного треугольника, и, в частности, в форме равностороннего треугольника.

Объект исследования представляет собой двумерную систему из бесконечных цилиндров, центры которых находятся в вершинах равнобедренного треугольника с длиной основания d_1 и боковой стороны – d_2 (см. рис. 1). Радиус цилиндров $R < (d_1, d_2)$.

¹⁾ e-mail: alexey.dmitriev@metalab.ifmo.ru

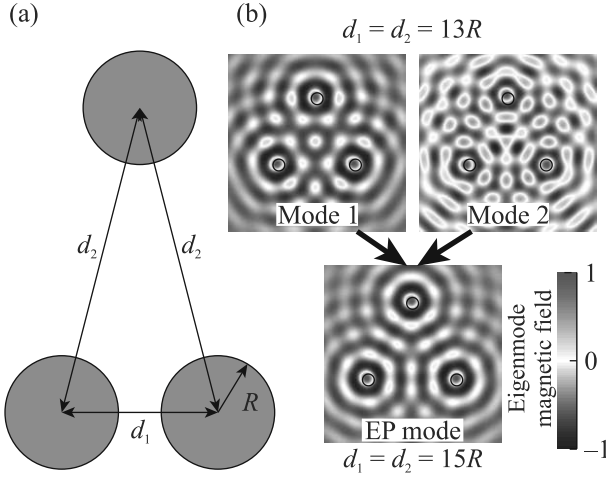


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Эскиз исследуемой системы – тримера бесконечных диэлектрических цилиндров в форме равнобедренного треугольника с основанием длиной d_1 и боковыми сторонами длиной d_2 . Все три цилиндра имеют одинаковый радиус и выполнены из диэлектрика с одинаковым показателем преломления. (б) – Иллюстрация вырождения распределения магнитного поля двух симметричных собственных мод тримеров бесконечных цилиндров с показателем преломления $n = 1.7 + 0.007i$ в форме равностороннего треугольника в исключительной точке (EP), которая образуется при $d_1 = d_2 = 15R$

Ось z выбрана вдоль осей цилиндров. В двумерной задаче решение распадается на ТЕ и ТМ поляризации, которые могут быть исследованы независимо. В данной работе будет рассматриваться ТЕ поляризация, в которой вектор магнитного поля $\mathbf{H} = [0, 0, \psi]^T$ параллелен оси цилиндров; при этом для ТМ поляризации физическая картина не отличается, и детальное изложение этого случая оказывается излишним.

На основе теории многоволнового рассеяния [18–28] может быть записана система уравнений связанных диполей для системы из трех цилиндров [17, 29]

$$\begin{aligned} (\hat{E} - a_0 \hat{L}) \mathbf{p} &= a_0 \mathbf{p}_{\text{exc}}, \\ \hat{L} &= \begin{bmatrix} 0 & \Xi(\frac{\omega}{c} d_1) & \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) \\ \Xi(\frac{\omega}{c} d_1) & 0 & \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) \\ \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) & \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\hat{E}$ – единичная матрица, a_0 – дипольный коэффициент Лоренца–Ми для цилиндра, ω – частота, c – скорость света, $\mathbf{p}$ – вектор дипольных амплитуд цилиндров, $\mathbf{p}_{\text{exc}}$ – вектор возбуждения, а $\Xi(x) = H_0^{(1)}(x)$ – коэффициент связи дипольных мод ци-

линдров (функция Ханкеля; предполагается частотная зависимость $e^{-i\omega t}$).

Аппроксимируя коэффициент Лоренца–Ми вблизи резонанса простым полюсом $a_0 \simeq i\Gamma/(\omega - \omega_0)$, где ω_0 – полюс рассеяния, а $\Gamma = -i \lim_{\omega \rightarrow \omega_0} a_0(\omega - \omega_0)$ – сила осциллятора, можно привести уравнение на собственные моды к виду $(\hat{\mathcal{H}} - \omega \hat{E}) \mathbf{p} = 0$ [29], где эффективный гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{bmatrix} \omega_0 & \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_1) & \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) \\ \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_1) & \omega_0 & \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) \\ \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) & \Gamma \Xi(\frac{\omega}{c} d_2) & \omega_0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Данный гамильтониан зависит от собственной частоты ω , таким образом, задача о поиске его собственных чисел записывается в обобщенном виде поиска нулей функции $f(\omega) = \det(\hat{\mathcal{H}} - \omega \hat{E})$. Из-за симметрии равнобедренного треугольника, $f(\omega)$ может быть представлена в факторизованном виде

$$f(\omega) = \left[\omega_0 - \omega - \Gamma \Xi\left(\frac{\omega}{c} d_1\right) \right] \times \left[(\omega_0 - \omega)^2 + \Gamma \Xi\left(\frac{\omega}{c} d_1\right) (\omega_0 - \omega) - 2\Gamma^2 \Xi^2\left(\frac{\omega}{c} d_2\right) \right]. \quad (3)$$

Для того, чтобы получить уравнения на частоту исключительной точки ω_{EP} , проследуем процедуре, описанной подробно в [16]. Разложим $f(\omega)$ в ряд Тейлора вокруг ω_{EP} . При равенстве нулю первых двух коэффициентов разложения корень имеет кратность не менее 2 и оказывается кандидатом на исключительную точку. Было показано [17], что такие двукратные корни действительно являются исключительными точками. Таким образом, уравнения на частоту исключительной точки получаются из условий $f(\omega_{\text{EP}}) = 0$ и $f'(\omega_{\text{EP}}) = 0$.

Важным обстоятельством является то, что в случае, когда функция $f(\omega)$ факторизуется, описанную процедуру можно выполнять для каждого сомножителя в отдельности. Для первого сомножителя в квадратных скобках, который соответствует собственным модам, антисимметричным относительно высоты, опущенной на основание треугольника (далее для краткости будем говорить “антисимметричным по направлению основания”), получаются таким образом следующие уравнения на частоту исключительной точки и соответствующий полюс рассеяния одного цилиндра:

$$\begin{cases} \omega_0 = \omega_{\text{EP}} + \Gamma \Xi\left(\frac{\omega_{\text{EP}} d_1}{c}\right), \\ \frac{\Gamma d_1}{c} \Xi'\left(\frac{\omega_{\text{EP}} d_1}{c}\right) = -1. \end{cases} \quad (4)$$

Коэффициент связи между частицами содержит осциллирующую функцию $\Xi(x)$, следовательно, он является осциллирующей функцией частоты. Из этого следует наличие у системы (4) бесконечного числа решений [17]. Так, тример имеет бесконечное число антисимметричных дипольных мод с различным числом нулей поля на основании треугольника. Вырождение распределений поля двух таких мод и соответствует исключительной точке.

Стоит отдельно выделить тот факт, что уравнения (4) совпадают с таковыми для исключительных точек, образованных при совпадении двух антисимметричных мод в димерах диэлектрических частиц [17, 30]. Действительно, поле данных мод является нулевым на линии, на которой находится третий цилиндр (вершина), следовательно взаимодействие с этим цилиндром отсутствует, и эффективно в данной моде участвует лишь основание треугольника, то есть димер.

Для второго сомножителя получаются следующие уравнения на частоту исключительной точки:

$$\begin{aligned} & \frac{\Gamma^2 d_1^2}{c^2} \left[\Xi \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) + \right. \\ & \left. + 8 \frac{d_2}{d_1} \Xi \left(\frac{\omega_{EP} d_2}{c} \right) \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_2}{c} \right) \right]^2 - \\ & - \left(\frac{\Gamma d_1}{c} \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) - 2 \right)^2 \times \\ & \times \left[\Xi^2 \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) + 8 \frac{d_2}{d_1} \Xi^2 \left(\frac{\omega_{EP} d_2}{c} \right) \right] = 0, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\omega_0 = \omega_{EP} + \Gamma \frac{4 \frac{\Gamma d_2}{c} \Xi \left(\frac{\omega_{EP} d_2}{c} \right) \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_2}{c} \right) + \Xi \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right)}{\frac{\Gamma}{c} d_1 \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) - 2}. \quad (6)$$

Рассмотрим отдельно случай равностороннего треугольника ($d_1 = d_2 = d$). В этом случае, уравнение (3) может быть факторизовано иным способом:

$$f(\omega) = [\omega_0 - \omega + 2\Gamma\Xi(\frac{\omega d}{c})][\omega_0 - \omega - \Gamma\Xi(\frac{\omega d}{c})]^2. \quad (7)$$

Таким образом, исключительная точка, описываемая уравнениями (4) и соответствующая антисимметричной собственной моде, оказывается вырождена дважды. Действительно, из теории групп следует наличие в системе с симметрией C_3 двух вырожденных мод “вращения по и против часовой стрелки”, которые также могут быть представлены в неортогональном базисе из антисимметричных по двум ребрам мод, и симметричной моде, которой в данном случае соответствует первый сомножитель в квад-

ратных скобках. Уравнения на исключительную точку для него

$$\begin{cases} \omega_0 = \omega_{EP} - 2\Gamma\Xi \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right), \\ 2 \frac{\Gamma d_1}{c} \Xi' \left(\frac{\omega_{EP} d_1}{c} \right) = 1. \end{cases} \quad (8)$$

Рассматривая случай ($d_1 = d_2$) в уравнениях (5) и (6) нетрудно также прийти к уравнениям (4) и (8). На рисунке 1b показано распределение поля симметричной моды в исключительной точке, которая образуется на частоте $\omega_{EP} = (1.728 + 0.066i)c/R$ при $d_1 = d_2 = 15R$. Для сравнения показаны две симметричные собственные моды тримера с $d_1 = d_2 = 13R$, которые в исключительной точке оказываются вырождены.

На рисунке 2 показаны собственные частоты димера с расстоянием $d = 15R$ между центрами цилиндров и тримера в форме равностороннего треугольника со стороной $d_1 = d_2 = 15R$. Комплекс-

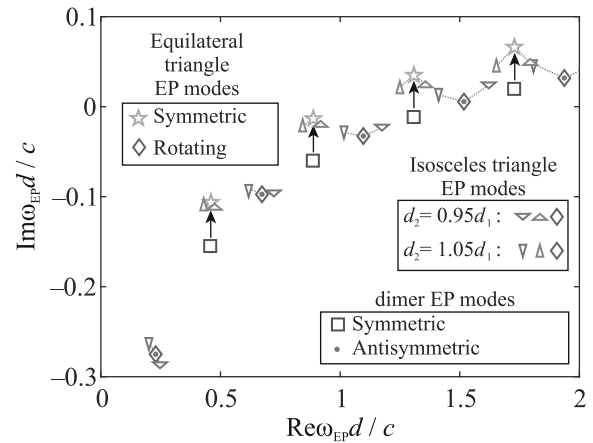


Рис. 2. (Цветной онлайн) Комплексные собственные частоты димера и тримера в виде равностороннего ($d_1 = d_2 = d$) и равнобедренных треугольников из бесконечных диэлектрических цилиндров, соответствующие исключительным точкам. Маркеры различной формы соответствуют модам: симметричной в димере (квадрат), антисимметричной в димере (точка), симметричной в тримере в форме равностороннего треугольника (звезда) и вращательным в тримере (ромб); маркеры в форме остроугольных треугольников, направленных вверх и вниз, показывают собственные частоты тримера в форме равнобедренного треугольника с $d_2 = 1.05d_1$, а тупоугольных – с $d_2 = 0.95d_1$. Стрелки показывают увеличение добротности при переходе от симметричных мод димера к тримеру. ТЕ поляризация, $d = 15R$

ные собственные частоты вращательных мод тримера совпадают с частотами антисимметричных мод

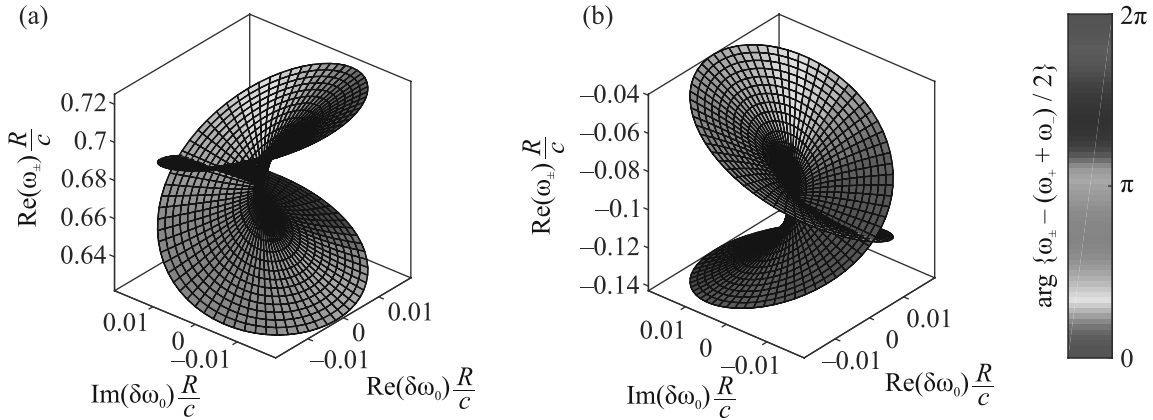


Рис. 3. (Цветной онлайн) Собственные частоты тримера в форме равностороннего треугольника ($d_1 = d_2 = 15R$), как зависимость комплексной отстройки $\delta\omega - i\delta\gamma$ от исключительной точки: частота собственной моды (а), коэффициент затухания собственной моды (б)

димера, в то время, как частоты симметричных мод тримера располагаются в области больших значений по мнимой оси по сравнению с частотами симметричных мод димера. Отрицательная мнимая часть частоты соответствует затухающим модам, а положительная – усиливающимся, таким образом, для частот, находящихся на отрицательной мнимой полуоси симметричные моды тримера имеют увеличенную добротность $Q = -\text{Re}\omega_{\text{EP}}/\text{Im}2\omega_{\text{EP}}$ по сравнению с димером, а на положительной – большой коэффициент усиления. Таким образом, добавление третьего цилиндра не приводит к изменению частоты (рис. 2), но приводит к увеличению добротности за счет понижения симметрии системы.

На рисунке 3 показаны собственные частоты $\omega_{\pm}$ тримера в форме равностороннего треугольника с длиной стороны $d = 15R$ в окрестности исключительной точки $\omega_{\text{EP}} = (0.67 - 0.1i)c/R$, которая соответствует вращательным модам. Для данной исключительной точки $\omega_0 = (0.68 - 0.03i)c/R$, что соответствует показателю преломления $n = 3.41 - 0.16i$. Топология листов собственных частот соответствует поверхности Римана квадратного корня, что говорит о том, что исключительная точка имеет первый порядок, т.е. в ней происходит вырождение распределения поля только двух мод.

Рассмотрим отдельно характер этого вырождения. Сомножителям в (7) соответствуют различные собственные векторы:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T, \\ \mathbf{v}_2 &= \begin{bmatrix} 1 & e^{i(2\pi/3)} & e^{i(4\pi/3)} \end{bmatrix}^T, \\ \mathbf{v}_3 &= \begin{bmatrix} 1 & e^{-i(2\pi/3)} & e^{-i(4\pi/3)} \end{bmatrix}^T, \end{aligned} \quad (9)$$

из которых симметричная мода $\mathbf{v}_1$ соответствует первому сомножителю в квадратных скобках, а вырожденные вращательные моды $\mathbf{v}_2$ и $\mathbf{v}_3$ – второму. Таким образом, каждая точка на листах собственных частот на рис. 3 соответствует двукратно вырожденным вращательным модам, а они, в свою очередь, имеют разные распределения поля, исходя из симметрии. Помимо этого, исключительные точки симметричных мод находятся на других частотах, а симметрия также запрещает вырождение распределений поля между симметричными и вращательными модами. Из этого следует, что существование исключительных точек высшего порядка в симметричных тримерах невозможно. Если же записать систему уравнений, приравнивающую нулю не два, а три первых члена разложения ряда Тейлора, что соответствует исключительной точке третьего порядка, образованной модами одинаковой симметрии, система (4) дополняется уравнением

$$\Xi'' \left(\frac{\omega_{\text{EP}} d_1}{c} \right) = 0, \quad (10)$$

и не имеет решений с $\text{Re}\omega_{\text{EP}} > 0$.

Одним из способов достижения большей добротности мод является понижение симметрии системы [14, 31, 32], поэтому для понижения симметрии тримера с C_3 до C_2 рассмотрим равнобедренный треугольник с $d_1 \neq d_2$. Частоты его исключительных точек описываются системой уравнений (4) для антисимметричных по направлению направления основания мод, и (5), (6) – для оставшихся двух типов мод, которые в случае равностороннего треугольника превращаются в симметричные и антисимметричные по направлению одной из боковых сторон. На рисунке 4 показаны зависимости комплексных собствен-

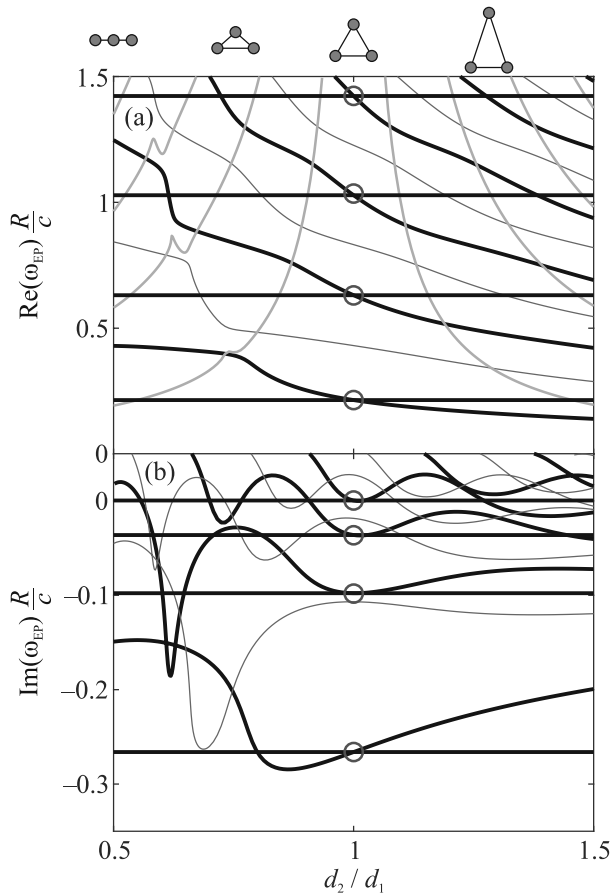


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости вещественных (a) и мнимых (b) частей частот исключительных точек в тримерах в форме равнобедренного треугольника от соотношения сторон d_2/d_1 треугольника. Горизонтальными линиями показаны частоты мод, нечетных по направлению основания треугольника – их частоты не зависят от соотношения сторон. Кругами показаны точки вырождения частот за счет симметрии в равнобедренном треугольнике

ных частот этих мод от соотношения сторон d_2/d_1 треугольника с $d_1 = 15R$. Из рисунка 4b видно, что добротности мод имеют осцилляционный характер, при этом мнимые части частот тех мод, которые при $d_2 = d_1$ превращаются в антисимметричные, имеют локальный минимум в этой точке (кроме моды с самой нижней частотой, не имеющей в этой точке экстремума), а мнимые части частот остальных мод, которые превращаются в симметричные, имеют в этой точке максимум. Также имеется набор мод, вещественные части частот которых при приближении к точке d_2/d_1 возрастают и уходят выше квадрупольного резонанса, поэтому они не могут быть использованы для увеличения добротности. Их мнимые части на панели рис. 4b не показаны, дабы не перегружать рисунок.

На рисунке 2 показаны также собственные частоты тримеров в форме равнобедренных треугольников с $d_2 = 0.95d_1$ и с $d_2 = 1.05d_1$. Из рисунка 2 также видно, что при небольшом отклонении соотношения сторон от случая равностороннего треугольника, добротность симметричных мод уменьшается, а вырожденные антисимметричные моды расщепляются, причем для мод, антисимметричных вдоль боковой стороны треугольника, добротность увеличивается, а для антисимметричных вдоль основания – остается неизменной. При этом частоты всех мод, кроме поднабора антисимметричных вдоль основания треугольника, изменяются в зависимости от соотношения сторон.

Таким образом, нарушение симметрии вследствие перехода от равностороннего треугольника к равнобедренному вносит еще одну степень свободы, позволяя более точно настроить добротность, однако в этом случае изменение добротности будет сопровождаться и перестройкой резонансной частоты.

Закключение. Был рассмотрен тример цилиндров в форме равностороннего и равнобедренных треугольников. Мы продемонстрировали, что, при переходе от димера к тримеру антисимметричные моды, распределение поля и комплексные собственные частоты исключительных точек антисимметричных мод не изменяются, а частоты симметричных мод сдвигаются в сторону больших значений вдоль мнимой оси. Таким образом, затухающие симметричные моды в тримере имеют большую добротность по сравнению с димером. Также было исследовано поведение комплексных собственных частот в тримере в форме равнобедренного треугольника в зависимости от соотношения длин основания и боковой стороны. Обнаружено, что в одном подмножестве мод собственные частоты не зависят от соотношения длин, в то время как остальные моды демонстрируют наличие такой зависимости. Зависимость добротности этих мод от соотношения сторон имеет осцилляционный характер. Таким образом, в системе появляется дополнительная степень свободы, оптимизация которой позволяет более точно настроить добротность тримера, однако в этом случае изменение добротности будет сопровождаться и перестройкой резонансной частоты.

Полученные результаты могут быть полезны для проектирования метаповерхностей, работающих в режимах, близких к исключительной точке.

Авторский коллектив благодарит за финансовую поддержку Российский научный фонд (грант # 21-79-10190).

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует.

1. R. El-Ganainy, K. G. Makris, M. Khajavikhan, Z. H. Musslimani, S. Rotter, and D. N. Christodoulides, *Nat. Phys.* **14**, 11 (2018).
2. L. Feng, R. El-Ganainy, and L. Ge, *Nat. Photon.* **11**, 752 (2017).
3. M.-A. Miri and A. Alù, *Science* **363**, eaar7709 (2019).
4. Ş. K. Özdemir, S. Rotter, F. Nori, and L. Yang, *Nat. Mater.* **18**, 783 (2019).
5. Z. Lin, H. Ramezani, T. Eichelkraut, T. Kottos, H. Cao, and D. N. Christodoulides, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 213901 (2011).
6. L. Feng, X. Zhu, S. Yang, H. Zhu, P. Zhang, X. Yin, Y. Wang, and X. Zhang, *Opt. Express* **22**, 1760 (2013).
7. L. Feng, M. Ayache, J. Huang, Y.-L. Xu, M.-H. Lu, Y.-F. Chen, Y. Fainman, and A. Scherer, *Science* **333**, 729 (2011).
8. K. J. H. Peters and S. R. K. Rodriguez., *Phys. Rev. Lett.* **129**, 013901 (2022).
9. S. Y. Min, J. Y. Kim, S. Yu, S. G. Menabde, and M. S. Jang, *Phys. Rev. Appl.* **14**, 054041 (2020).
10. A. Abdrabou and Y. Y. Lu, *J. Opt. Soc. Am. B* **36**, 1659 (2019).
11. K. Pichugin, A. Sadreev, and E. Bulgakov, *Photonics* **8**, 460 (2021).
12. A. C. Valero, *J. Phys. Conf. Ser.* **2015**, 012028 (2021).
13. W. Yan, P. Lalanne, and M. Qiu, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 013901 (2020).
14. E. Bulgakov, K. Pichugin, and A. Sadreev, *Phys. Rev. A* **104**, 053507 (2021).
15. A. C. Valero, V. Bobrovs, D. Redka, A. S. Shalin, and Y. Kivshar, arXiv preprint arXiv:2205.05735 (2022).
16. A. Dmitriev and M. Rybin, *AIP Conf. Proc.* **2300**, 020022 (2020).
17. A. A. Dmitriev and M. V. Rybin, *Phys. Rev. A* **108**, 013518 (2023).
18. P. Lloyd and P. Smith, *Adv. Phys.* **21**, 69 (1972).
19. K. M. Leung and Y. Qiu, *Phys. Rev. B* **48**, 7767 (1993).
20. X. Wang, X.-G. Zhang, Q. Yu, and B. Harmon, *Phys. Rev. B* **47**, 4161 (1993).
21. D. Felbacq, G. Tayeb, and D. Maystre, *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, 2526 (1994).
22. A. Moroz, *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 171 (1994).
23. N. A. Nicorovici, R. C. McPhedran, and L. C. Botten, *Physical Review E* **52**, 1135 (1995).
24. G. Tayeb and S. Enoch., *Journal of the Optical Society of America A* **21**, 1417 (2004).
25. P. Markoš and V. Kuzmiak, *Physical Review A* **94**, 033845 (2016).
26. P. Markoš, *Optics Communications* **361**, 65 (2016).
27. A. Egel, L. Pattelli, G. Mazzamuto, D. S. Wiersma, and U. Lemmer, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **199**, 103 (2017).
28. E. E. Maslova, M. F. Limonov, and M. V. Rybin, *Optics Letters* **43**, 5516 (2018).
29. A. A. Dmitriev and M. V. Rybin, *Phys. Rev. A* **99**, 063837 (2019).
30. A. A. Dmitriev and M. V. Rybin, *Phys. Rev. A* **103**, 053514 (2021).
31. H. M. Lai, P. T. Leung, and K. Young, *Phys. Rev. A* **41**, 5199 (1990).
32. C. C. Lam, P. T. Leung, and K. Young, *J. Opt. Soc. Am. B* **9**, 1585 (1992).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 119

Выпуск 10

25 мая 2024

*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.ru>

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

Вычисление сечений резонансного рассеяния нейтронов на ядре ${}^9\text{Be}$ с использованием данных *ab initio* расчетов асимптотических нормировочных коэффициентов и распадных ширин

Д. М. Родкин^{+*1)}, Ю. М. Чувильский*

⁺Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия

*Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына
МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 ноября 2023 г.

После переработки 10 апреля 2024 г.

Принята к публикации 11 апреля 2024 г.

Представлен теоретический подход, позволяющий использовать результаты *ab initio* расчетов асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний и парциальных ширин распада резонансных состояний на основе оболочечной модели без инертного кора, для вычисления сечений резонансных ядерных реакций. На примере процесса ${}^9\text{Be}(n, n){}^9\text{Be}$ показано, что использование этих исходных данных в расчетах сечений рассеяния нейтронов дает возможность описать его сечение с хорошей точностью. Демонстрируется, в то же время, что точность *ab initio* расчетов энергий резонансов на данный момент недостаточна для чисто теоретического описания сечения рассеяния. Вследствие этого развитый подход строится как “гибридный”, частично базирующийся на использовании для известных уровней экспериментально полученных значений энергий резонансов.

DOI: 10.31857/S123456782410001X, EDN: BXIIJE

Современная теория структуры легких атомных ядер дает возможность получать многие их характеристики как конечный результат решения А-нуклонной задачи. При этом динамика А-нуклонной системы описывается реалистическими нуклон-нуклонными потенциалами, построенными с использованием Киральной Эффективной Теории Поля (КЭТП) [1–4]. Амплитуды диаграмм мезонного обмена в ней фитируются на основе полного набора наблюдаемых данных, полученных для 2N- и 3N-систем. Как правило, проводится “смягчение” полученного потенциала за счет преобразования ренорм-группы, которое сохраняет наблюдаемые величины, характеризующие эти системы. Такие подходы носят общее название *ab initio* (из первопринципов). Одним из основных методов, описывающих структуру легких ядер, является Модель Оболочек Без Инертного Кора (МОБИК) [5, 6]. Как и другие *ab initio* схемы, она используется для расчетов энергий связи и размеров ядер, энергий возбуждения ядерных состояний, электромагнитных моментов и вероятностей электромагнитных переходов. МОБИК и подобные ей методы, однако, не приспособлены для непосредственного описания

распада ядерных состояний и ядерных реакций. Для решения таких задач были предложены разные *ab initio* подходы, описывающие процесс перехода полученных в рамках МОБИК состояний, лежащих выше порога распада во входные и выходные кластерные каналы. Среди них методы, которые объединяют МОБИК и Модель Резонирующих Групп (МРГ) [7], а именно, близкие по своей структуре МОБИК/МРГ [8] и Модель Оболочек Без Инертного Кора с Континуумом (МОБИКК) [9] являются наиболее последовательными. Следует, однако, отметить, что они успешно применялись для описания реакций с нуклонами и дейтронами во входном и выходном каналах. Исследование в этой схеме процессов с числом открытых каналов, превышающим два, и реакций с более тяжелыми кластерами, представляется затруднительным.

Для расширения списка доступных для решения задач обсуждаемого класса авторами был разработан новый подход – Метод Ортогональных Функций Кластерных Каналов (МОФКК) [10–15]. Эта схема позволяет провести расчет асимптотических нормировочных коэффициентов (АНК) связанных состояний и амплитуд приведенных парциальных ширин (АППШ) распада резонансов в самые различные кластерные каналы (КК), используя А-нуклонные

¹⁾e-mail: rodkindm92@gmail.com

решения МОБИК и, в отличие от МОБИКК, процедуру проектирования их на антисимметризованные произведения ВФ фрагментов распада и ВФ их относительного движения.

Кратко представим основные моменты подхода МОФКК. Более подробно данный подход изложен в работах [13, 15]. Первым элементом этого метода являются вычисления собственных значений и собственных векторов гамильтониана в рамках стандартной М-схемы МОБИК на полном базисе детерминантов Слейтера (ДС) с параметром обрезания по суммарному числу квантов возбуждения $N_{\max}^*$. Затем осуществляется экстраполяция собственных значений гамильтониана на бесконечный размер базиса. Далее проводится построение трансляционно-инвариантных А-нуклонных ВФ двухфрагментного ($A = A_1 + A_2$) КК c_κ :

$$\Psi_{A,nl}^{c_\kappa} = \hat{A} \{ \Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Psi_{A_2}^{\{k_2\}} \varphi_{nl}(\rho) \}_{J_c J M_J T}, \quad (1)$$

где $\hat{A}$ – антисимметризатор, $\Psi_{A_i}^{\{k_i\}}$ – трансляционно-инвариантная внутренняя ВФ фрагмента, задаваемая набором квантовых чисел $\{k_i\}$; $\varphi_{nlm}(\rho)$ – ВФ относительного движения. В конечном итоге, каждая такая ВФ сводится к суперпозиции ДС. Построение из этих не ортогональных ВФ ортонормированных базисных функций канала c_κ выполняется путем диагонализации матрицы обменного ядра

$$||N_{nn'}|| = \langle \Psi_{A,n'}^{c_\kappa} | \Psi_{A,n}^{c_\kappa} \rangle. \quad (2)$$

Вычисляются собственные значения $\varepsilon_{\kappa,k}$ и собственные функции $f_l^k(\rho)$ этой матрицы. Кластерный формфактор (КФФ), который описывает относительное движение кластеров A_1 и A_2 , выражается в виде:

$$\Phi_A^{c_\kappa}(\rho) = \sum_k \varepsilon_{\kappa,k}^{-1/2} \langle \Psi_A | \hat{A} \{ \Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Psi_{A_2}^{\{k_2\}} f_l^k(\rho) \} \rangle f_l^k(\rho). \quad (3)$$

Развернутое описание развитого нами формализма представлено в работах [13, 14].

Как и в работах [14, 15], для определения распадных характеристик мы используем процедуру сравнения логарифмических производных КФФ и асимптотической волновой функцией соответствующего открытого или закрытого канала. Таким образом в первом случае получаем АППШ γ_{c_κ} и сами ширины Γ ; во втором – АНК $\mathcal{A}^{c_\kappa}$.

Расчеты показывают, что полученные в рамках процедуры сшивки величины АНК и АППШ, в отличие от выражающихся через них значений ширины подпороговых и надпороговых резонансов, слабо зависят от энергии этих резонансов. Демонстрируемая

ниже сильная зависимость сечения $\sigma(E)$ порождается его пропорциональностью произведению $P_l(E)A^{c_\kappa}$ или $P_l(E)\gamma_{c_\kappa}$, где $P_l(E)$ – проницаемость потенциального барьера при энергии E .

Возможность, причем реальная, вычислять АНК и АППШ каналов распада в рамках МОФКК, позволяет поставить следующую крайне важную задачу – разработать метод использования рассчитанных в *ab initio* подходах величин в теории ядерных реакций. Дело в том, что амплитуды и сечения резонансных реакций в рамках R-матричной теории ядерных реакций выражаются именно через АНК и АППШ. Решению этой задачи, в данном случае – задачи описания сечений индуцированных нейтронами процессов, идущих через образование компаунд-ядра, и посвящена данная статья.

В качестве объекта исследования в данной работе было выбрано сечение упругого резонансного рассеяния нейтронов на ядре ${}^9\text{Be}$. Спектр уровней образующегося при этом компаунд-ядра ${}^{10}\text{Be}$, как связанных, так и резонансных, достаточно хорошо промерен. Сводка спектральных данных об уровнях ${}^{10}\text{Be}$ приведена в работе [16]. Также, ядро ${}^{10}\text{Be}$ представляет собой популярный объект теоретических исследований. В частности, расчету ширины его околопороговых резонансов посвящена наша работа [17], а альфа-распадных ширины – [18]. В этих работах можно найти достаточно подробный список работ, посвященный вычислению энергий уровней ${}^{10}\text{Be}$.

В пользу выбора данного процесса в качестве теста разработанного метода говорят следующие обстоятельства. Во-первых, в области небольших энергий нейтронов можно ожидать одновременного влияния как под-, так и надпороговых резонансов [17]. Во-вторых, из-за ненулевого спина ядра-мишени в сечение изучаемого процесса вносят вклад многие АППШ. В третьих, в верхней части изучаемого диапазона энергий ($0 \leq E_n \leq 3 \text{ МэВ}$) открывается канал альфа-распада, за счет этого меняются полные ширины резонансов и, следовательно, сечение рассеяния нейтронов.

Для получения представленных в данной работе результатов использовался базис, включающий все десяти-нуклонные ДС с оптимальным для этой системы осцилляторным параметром $\hbar\omega = 17.5 \text{ МэВ}$ вплоть до числа квантов возбуждения $N_{\max}^* = 10$. Размерность этого базиса – $1.34 \cdot 10^9$ ДС. Таким образом, характеристики состояния положительной четности вычислялись для базисов с $N_{\max}^* = 0, 2, \dots, 10$, а отрицательной четности – для $N_{\max}^* = 1, 3, \dots, 9$. Использовался потенциал Daejeon16 [4], который был проверен в разнообразных расчетах свойств ядер с

массами $A \leq 16$ и доказал свою эффективность. Расчеты в рамках МОБИК были выполнены с помощью кода Bigstick [19], который удобен для использования на многопроцессорных вычислительных кластерах.

Результаты МОБИК расчетов энергий состояний ядра ${}^{10}\text{Be}$ на максимальном доступном для расчетов базисе с $N_{\text{max}}^* = 10$ сходятся не полностью, поэтому в дополнение проводится их экстраполяции. В данной работе для получения полных энергий связи состояний (ПЭС) ядра ${}^{10}\text{Be}$ в “бесконечном” базисе МОБИК использовался метод экстраполяции “A5” [20].

Результаты непосредственного применения расчетов МОБИК, соответствующие им результаты экстраполяции энергий возбуждения уровней, а также экспериментальные данные из [16] в диапазоне энергий возбуждения ${}^{10}\text{Be}$ вплоть до $E^* \sim 10$ МэВ представлены в табл. 1. Сравнение ее второго и третьего

Таблица 1. Теоретические и экспериментальный спектры уровней ядра ${}^{10}\text{Be}$

J^π	E_{th}^*	E_{extr}^*	E_{exp}^*	$E_{\text{n}}^{\text{extr}}$	$E_{\text{n}}^{\text{exp}}$	E_{α}^{extr}	E_{α}^{exp}
0_1^+	0.00	0.00	0.00	-6.61	-6.81	-7.26	-7.41
2_1^+	3.78	3.72	3.37	-2.88	-3.44	-3.53	-4.04
0_2^+	8.55	4.43	6.18	-2.17	-0.63	-2.83	-1.23
1_1^-	7.23	5.87	5.96	-0.73	-0.85	-1.39	-1.45
2_2^+	6.67	6.28	5.96	-0.33	-0.85	-0.98	-1.45
2_1^-	7.83	6.49	6.26	-0.11	-0.55	-0.77	-1.14
3_1^-	9.04	7.71	7.37	1.11	0.56	0.45	-0.04
2_3^+	10.18	8.49	7.54	1.88	0.73	1.24	0.13
1_1^+	9.49	8.71	—	2.09	—	1.44	—
2_2^-	10.81	9.09	—	2.23	—	1.83	—
4_1^+	14.31	9.63	—	2.765	—	2.37	—
2_4^+	11.64	9.84	—	2.98	—	2.58	—
4_1^-	11.45	9.99	9.27	3.39	2.46	2.73	1.86
2_5^+	10.55	10.35	9.56	3.74	2.85	3.08	2.14

столбцов наглядно демонстрирует важность процедуры экстраполяции. В результате ее применения легко найти партнеров всем экспериментально наблюдаемым в этом диапазоне уровням. С общепринятых позиций оценки результатов спектральных расчетов, соответствие между экспериментальными E_{exp}^* и экстраполированными E_{extr}^* энергиями возбуждения для большинства известных уровней представляется хорошим. E_{exp}^* воспроизводятся со средней точностью в несколько сотен кэВ. Исключение составляет лишь уровень 0_2^+ . Расчеты указывают на существование в исследованном диапазоне значительного количества теоретически рассчитанных уровней, которым не находится обнаруженных в экспериментах партнеров. Энергии резонансов определяются еще и пороговыми энергиями каналов распада ${}^6\text{He} + {}^4\text{He}$ и ${}^9\text{Be} + n$. Они получаются в расчетах

ПЭС основных состояний ${}^6\text{He}$, ${}^4\text{He}$, ${}^9\text{Be}$ и ${}^{10}\text{Be}$. Как следует из этих расчетов, теоретически вычисленная пороговая энергия для канала ${}^9\text{Be} + n$ отличается от экспериментально известной на 203 кэВ, а для канала ${}^6\text{He} + {}^4\text{He}$ на 149 кэВ, что в процентном отношении к характерным энергиям связи этих ядер совсем мало, но при расчете энергий возбуждения околопороговых резонансов такое отклонение вносит дополнительную (и существенную) ошибку. Вычисленные нейтронные АНК $\mathcal{A}_n$ и парциальные ширины нейтронного и альфа-распада $\Gamma_{n(\alpha)}$, а также знаки их амплитуд (отрицательные значения помечены знаком $(-)$) для компаунд-состояний, вносящих сколь-нибудь заметный вклад в сечение нейтронного рассеяния (в табл. 1 они выделены жирным прифтом) представлены в табл. 2. Верхние индексы extr. или exp. обозначают, что данные величины получены для экстраполированной или экспериментальной энергии уровня соответственно. Указаны также энергии нейтронов, спины каналов S и моменты относительного движения фрагментов l .

Значения АНК каналов распада состояний 1_1^- и 2_1^- можно также извлечь из эксперимента [21], их значения представлены в последнем столбце табл. 2. Таким образом, вычисления АНК в рамках представленного подхода дают вполне удовлетворительные результаты, и, как указано выше, величины АНК довольно слабо зависят от энергии. В то же время ширины распада демонстрируют резкую зависимость от энергии и для энергий, взятых из расчетов, оказываются завышенными. Если сравнивать полную ширину распада, то вычисление ее при экспериментальном значении энергии уровня 2_3^+ в пять раз превышает экспериментальный результат. Для экспериментально известных уровней 3_1^- , 4_1^- , 2_4^+ также наблюдается некоторое, не превосходящее двух раз превышение рассчитанных ширин над полученными из экспериментальных данных.

Все указанные выше расчеты проводились в рамках разработанных ранее и хорошо апробированных методов. В данной статье они являются частью цельного теоретического исследования сечения упругого рассеяния ${}^9\text{Be}(n, n){}^9\text{Be}$.

Для получения этих сечений использовался формализм R-матричной теории резонансных ядерных реакций. В рамках данного подхода учитывались парциальные ширины всех открытых каналов реакции, в том числе и канала ${}^4\text{He} + {}^6\text{He}$, так как пороговая энергия его превышает пороговую энергию нейтронного канала всего лишь на 600 кэВ.

Существует много компьютерных реализаций R-матричной теории. Для решения поставленной зада-

Таблица 2. Асимптотические характеристики ^{10}Be каналов $^9\text{Be} + n$ – АНК $\mathcal{A}_n(\text{фм}^{-\frac{1}{2}})$ при $E_n < 0$ и парциальные ширины $\Gamma_n(\text{кэВ})$ при $E_n > 0$

J^π	E_n^{extr}	$l(S)$	$\mathcal{A}_n^{\text{extr}}(\text{фм}^{-\frac{1}{2}})$ или $\Gamma_n^{\text{extr}}(\text{кэВ})$	E_n^{exp}	$\mathcal{A}_n^{\text{exp}}(\text{фм}^{-\frac{1}{2}})$ $\mathcal{A}_n(\text{фм}^{-\frac{1}{2}})$ [21] ^{b)} или $\Gamma_n^{\text{exp}}(\text{кэВ})$
1_1^-	−0.738	0(1)	(−)0.835	−0.852	(−)0.886 0.626 ^{b)}
2_1^-	−0.115	0(2)	(−)0.405	−0.548	(−)0.585 0.558 ^{b)}
3_1^-	1.106	2(1)	42.5	0.559	9.08
		2(2)	52.6		11.29
2_3^+	1.889	1(1)	5.887	0.73	2.11
		1(2)	98.1		33.58
1_1^+	2.098	1(1)	452	—	—
		1(2)	1790		—
2_2^-	2.230	0(2)	(−)859	—	—
		2(1)	102		—
		2(2)	62.9		—
2_5^+	3.737	1(1)	6.39	2.748	4.97
		1(2)	382		291
4_1^-	3.388	2(2)	638	2.458	366
2_4^+	2.978	1(1)	(−)17.4	—	—
		1(2)	513		—

чи наиболее адекватной версией этого подхода оказалась программа AZURE2 [22]. Помимо указанных выше, во входных параметрах программы AZURE2 фигурирует аналог точки сшивки. Но граница внутренней и асимптотической областей a_c определяется не отдельно для каждого канала, как это следует из аккуратного теоретического рассмотрения и реализуется в МОФКК, а как единая величина для каждой пары сталкивающихся и разлетающихся частиц, без учета их суммарного спина S и момента относительного движения l . При выборе радиуса сшивки в программе AZURE2 мы следовали рекомендациям ее авторов, т.е. выбирали его равным $a_c = R_0(\sqrt[3]{A_1} + \sqrt[3]{A_2})$, где $R_0 = 1.4$ фм, и непосредственными расчетами подтвердили крайне слабую зависимость результатов вычисления сечений резонансных реакций в широкой области изменения этого параметра.

Разработанный нами подход позволяет, в конечном итоге, использовать рассчитанные в рамках МОБИК ВФ компаунд-ядра, сталкивающихся и вылетающих частиц, полученные из этих ВФ АНК и АППШ для вычисления сечений резонансных ядерных реакций. Результаты применения данного подхода иллюстрирует рис. 1. На его верхней панели представлен вид сечения процесса $^9\text{Be}(n,n)^9\text{Be}$ для трех вариантов выбора входных данных, а также результаты измерений различных групп [23–26]. Во всех

трех вариантах использовались рассчитанные в рамках МОФКК АППШ нейтронных и альфа-распадных каналов. Энергии уровней брались: из эксперимента (сплошная и точечная линии), при их наличии, или из расчетов, базирующихся исключительно на экстраполяции (штриховая). В расчетах, результаты которых представлены точечной линией, использовались извлеченные из эксперимента АНК. Рисунок 1 демонстрирует, что “гибридный” вариант входных данных дает очень хорошее описание изучаемого сечения. Даже отмеченные ранее завышения полной ширины резонансов практически не сказываются на виде кривой. Лишь завышение значения АНК состояния 1_1^- приводит к небольшой переоценке сечения процесса при низких энергиях. Причиной этой устойчивости является структура формул Брейта–Вигнера, которые в окрестностях резонансов определяются отношениями парциальных и полных ширин. Редкие ситуации высокой чувствительности полных сечений резонансных реакций к величинам АППШ могут возникнуть лишь в областях интерференции АППШ резонансов с одинаковыми набором квантовых чисел $\{J^\pi, l, S\}$. Именно это свойство сечений открывает возможность применения не обладающих высокой точностью теоретических методов вычисления АППШ для их надежного расчета. Стоит отметить, что экспериментально определенные ширины подпороговых резонансов извлекаются, преимуще-

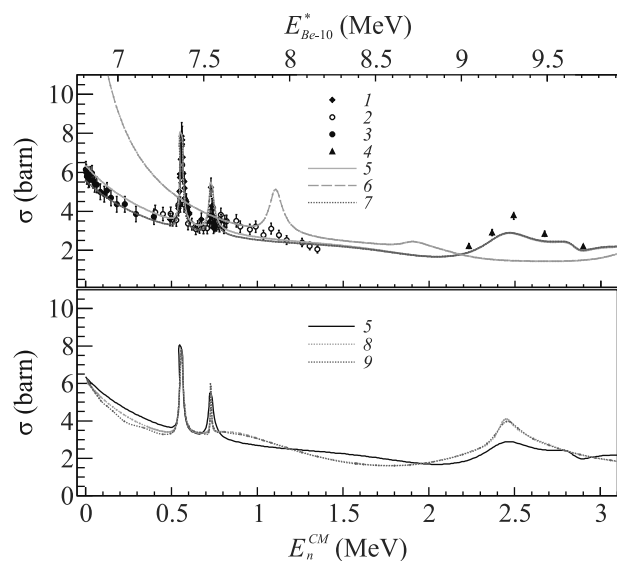


Рис. 1. Результаты расчета сечения упругого рассеяния $^9\text{Be}(n, n)^9\text{Be}$. Цифрами 1–4 на рисунке обозначены результаты измерений: 1 – Lane et al. (1964); 2 – Chien et al. (1966); 3 – Lyapin et al. (1989); 4 – Levin, Cranberg (1959); цифрами 5–7 – результаты расчетов: 5 – результаты расчета с экспериментальными значениями энергий резонансов, 6 – результаты расчета с теоретически рассчитанными значениями энергий резонансов, 7 – результаты расчета с экспериментальными значениями как энергий резонансов, так и АНК; цифрами 8, 9 – оцененные сечения: 8 – оцененное сечение из базы данных ENDF/B-VII.1 [27], 9 – оцененное сечение из базы данных RUSFOND-2010 [28]

щественно, из измеренных сечений того же процесса $^9\text{Be}(n, n)^9\text{Be}$ при низких энергиях. В этой области график сечения, полученный с использованием вычисленных значений АНК сравнивается, фактически, с кривой, полученной через АНК, извлеченные с помощью анализа самого этого сечения, полученного экспериментально. Влияние надпороговых резонансов на сечения здесь мало.

Резким контрастом по отношению к этой картине выглядит поведение штриховой кривой, полученной на базе рассчитанных энергий ядерных уровней и порогов распада в различные каналы. В области $E > 0.5$ МэВ эта кривая оказывается “растянутой”, причем неравномерно, по отношению к двум другим и эксперименту. Но особенно ярко недостатки такого варианта входных данных проявляется при низких энергиях. Главный фактор, влияющий на вид сечения, – положение подпороговых резонансов, в наибольшей мере – состояния 2_1^- . Причина этого – очевидна. Из примеров, представленных в табл. 1, следует, что точность современных реалистических нуклон-нуклонных потенциалов при расчетах ПЭС

нижних состояний легких ядер составляет примерно 0.3–1 %. Но точность теоретического расчета энергий резонансов, являющихся разностными характеристиками, во много раз ниже. Именно это, а также чрезвычайно сильная зависимость от энергии, входящей в выражения сечений как под- так и надпороговых резонансов проницаемости потенциального барьера ограничивает непосредственное использование результатов расчетов собственных значений гамильтониана МОБИК для вычисления сечений резонансных реакций при низких энергиях нейтронов. Большая длина волны медленного нейтрона служит “лупой”, резко увеличивающей этот элемент в общей картине сечения.

Нижняя панель рис. 1 дает возможность сравнить полученные нами сечения с оцененными согласно [27] и [28]. Видно хорошее совпадение представленных кривых. Оцененные значения немного лучше описывают измеренные сечения в низкоэнергетической области, а также в районах $E = 0.8$ и 2.5 МэВ. Мы полагаем, что, если включить в разработанную нами схему фитирование предсказанных теоретически резонансов, это рассогласование можно ликвидировать. Однако развитие такой версии подхода выходит за рамки данного исследования.

Итак, в настоящей работе демонстрируется “гибридный” подход, позволяющий использовать результаты *ab initio* расчетов АНК и парциальных ширин распада резонансов для вычисления сечений резонансных ядерных реакций при относительно низких энергиях. Представленное выше описание сечения процесса $^9\text{Be}(n, n)^9\text{Be}$, хорошо изученного экспериментально, показывает, во-первых, что этот подход позволяет получить весьма надежный (воспроизводящий и обогащающий полученный в экспериментах) список относящихся к этой области энергий уровней ядра с определенным значением J^π, T , а также каналов их распада. Во-вторых, в рамках этого подхода оказывается возможным получать не только асимптотические нормировочные коэффициенты и полные ширины распада, но также и амплитуды приведенных парциальных ширин со своими знаками, извлечение которых из измерительных данных и вычисление другими теоретическими методами весьма затруднительно. Выяснено, в то же время, что достигнутое в настоящее время качество результатов *ab initio* расчетов энергий возбуждения ядерных уровней систем массы $A \geq 6$ недостаточно для использования этих значений для вычисления распадных характеристик этих резонансов. В силу этого расчет сечений низкоэнергетических резонансных реакций приходится проводить, используя вычислен-

ные величины АНК и АППШ вместе с результатами измерений энергии этих уровней. Для резонансных процессов, экспериментальные данные о парциальных ширинах которых отсутствуют, противоречивы, ненадежны или получены с большими ошибками (а такие случаи встречаются очень часто и являются физически наиболее интересными), данный метод, на наш взгляд, позволяет получать сечения и другие характеристики, которые можно интерпретировать как “теоретически оцененные”. Метод также дает возможность сильно сокращать число параметров при фитировании экспериментальных данных в рамках R-матричной модели, оставляя в качестве свободных параметров только энергии резонансов в некотором диапазоне.

Авторы благодарны М. В. Косову за полезные замечания.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-22-00096, <https://rscf.ru/project/22-22-00096/>.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. R. Machleidt and D. R. Entem, Phys. Rep. **503**, 1 (2011).
2. D. R. Entem and R. Machleidt, Phys. Rev. C **66**, 014002 (2002).
3. D. R. Entem and R. Machleidt, Phys. Rev. C **68**, 041001 (2003).
4. A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris, and J. P. Vary, Phys. Lett. B **761**, 87 (2016).
5. C. Stump, J. Braun, and R. Roth, Phys. Rev. C **93**, 021301 (2016).
6. P. Navratil, S. Quaglioni, I. Stetcu, and B. Barrett, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **36**, 083101 (2009).
7. J. A. Wheeler, Phys. Rev. **52**, 1107 (1937).
8. S. Quaglioni and P. Navratil, Phys. Rev. C **79**, 044606 (2009).
9. S. Baroni, P. Navratil, and S. Quaglioni, Phys. Rev. C **87**, 034326 (2013).
10. Д. М. Родкин, Ю. М. Чувильский, Письма в ЖЭТФ **108**(7), 459 (2018).
11. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, J. Phys.: Conf. Ser. **966**, 012022 (2018).
12. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, Phys. Lett. B **788**, 238 (2019).
13. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, Chin. Phys. C **44**, 12410 (2020).
14. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, Phys. Rev. C **103**, 024304 (2021).
15. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, Phys. Rev. C **104**, 044323 (2021).
16. D. R. Tilley, J. H. Kelley, J. L. Godwin, D. J. Millener, J. E. Purcell, C. G. Sheu, and H. R. Weller, Nuclear Physics A **745**, 155 (2004).
17. D. M. Rodkin, Yu. M. Tchuvil'sky, Physics of Atomic Nuclei **85**(6), 836 (2022).
18. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, JETP Lett. **116**(10), 663 (2022).
19. C. W. Johnson, W. E. Ormand, K. S. McElvain, and H. Shan, arXiv: 1801.08432 (2018).
20. I. J. Shin, Y. Kim, P. Maris, J. P. Vary, C. Forssen, J. Rotureau, and N. Michel, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **44**, 075103 (2017).
21. S. I. Sukhoruchkin, Z. N. Soroko, V. V. Deriglazov et al. (Collaboration), *Low Energy Neutron Physics Springer-Verlag*, Berlin, Heidelberg, N.-Y. (1998).
22. E. Uberseder and R. J. deBoer, AZURE2 User Manual, <https://usermanual.wiki/Document/>
23. R. O. Lane, A. J. Elwyn, and A. Langsdorf, Phys. Rev. **133**, B409 (1964).
24. J. P. Chien and A. B. Smith, Nuclear Science and Engineering **26**(4), 500 (1966).
25. D. I. Lyapin, L. V. Mitsyna, A. B. Popov, I. M. Salamatina, and G. S. Samosvat, JINR-P3-89-408, 19890615 (1989).
26. J. S. Levin and L. Cranberg, Phys. Rev. **114**, 1584 (1959).
27. M. B. Chadwick, M. W. Herman, P. Obložinský et al. (Collaboration), Nuclear Data Sheets **112**, 2887 (2011).
28. S. V. Zabrodsкая, A. V. Ignatyuk, V. N. Koscheev, et al. (Collaboration), VANT, Nuclear Constants **1–2**, 3 (2007).

Shadowing and antishadowing in the rescaling model

A. V. Kotikov^{†1)}, A. V. Lipatov^{*×}, P. M. Zhang⁺

⁺*School of Physics and Astronomy, Sun Yat-sen University, 519082 Zhuhai, China*

^{*}*Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia*

[×]*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia*

Submitted 10 April 2024

Resubmitted 10 April 2024

Accepted 13 April 2024

DOI: 10.31857/S1234567824100021, EDN: JGIKEO

The study of deep inelastic scattering (DIS) of leptons on nuclei shows the appearance of a significant effect of nucleon interaction in the nucleus, which eliminates the naive idea of the nucleus as a system of quasi-free nucleons (see, for example, review [1–5]). This effect was first discovered [6] by the European Muon Collaboration (EMC) in the domain of valence quark dominance, therefore it was called the EMC effect. Influence of nuclear effects on parton distribution functions (PDFs) meets a lot of interest from both theoretical and experimental points of view. In particular, detailed knowledge of PDFs in a nuclei (nPDFs) is necessary for any theoretical description of pA and AA processes studied at modern (LHC, RHIC) and future colliders (FCC-he, EicC, EicC, NICA).

Usually the nuclear modification factor, defined as a ratio of per-nucleon structure functions in nuclei A and deuteron, $R = F_2^A(x, Q^2)/F_2^D(x, Q^2)$, or rather ratio of corresponding parton densities, is introduced and its behavior in the shadowing ($x \leq 0.1$), anti-shadowing ($0.1 \leq x \leq 0.3$), valence quarks and Fermi motion dominance regions ($0.3 \leq x \leq 0.7$ and $x \geq 0.7$, respectively) is investigated. Unfortunately, up to now there is no commonly accepted framework to describe this nuclear modification of PDFs in a whole kinematical range. Two main approaches are used by different groups at present. In the first, which is currently seems to be more popular, nPDFs are extracted from a global fit to nuclear data using some empirical parametrization of corresponding initial parton densities. Then, numerical solution of Dokshitzer–Gribov–Lipatov–Altarelli–Parisi (DGLAP) equations [7–11] is applied to describe their QCD evolution (see review [12] and references therein). The second strategy is based on special nPDF models (see, for example, [13–19] and review [20]).

The aim of this Letter is to study the nuclear modification of DIS structure function (SF) $F_2(x, Q^2)$ in the framework of the rescaling model [15–17]. The rescaling model is based on the assumption [18, 19] that the effective size of gluon and quark confinement in nucleus is greater than in a free nucleon. Within the framework of perturbative QCD this confinement rescaling predicts [15–19] that ordinary PDFs and nPDFs can be connected by simply shifting the values of the kinematic variable Q^2 (see also review [21]). Thus, the rescaling model demonstrates the features inherent in both approaches: there is the relationship between PDFs and nPDFs that arises as a result of shifting in the scale Q^2 and, at the same time, both PDFs and nPDFs obey the DGLAP equations. In a sense, the rescaling model corresponds to the first strategy with empirical nPDFs obtained from the corresponding PDFs by x -independent shift. Initially, it was proposed for the domain of valence quarks dominance and expanded recently to a low x range [22–25].

In the framework of rescaling model, we fitted the NMC experimental data for the ratios of the DIS structure functions $F_2(x, Q^2)$ in nuclear targets and deuteron at low and intermediate x values, $x \leq 0.7$. Our analysis is based on the analytical expressions for proton PDFs derived previously in [26]. Using the obtained results for rescaling values, we derive predictions for nPDFs for several nuclear targets and, thus, for shadowing and antishadowing effects. We find that shadowing effect for gluons is less than for quarks, which is consistent with many other studies. There is no antishadowing for gluons, and it is better pronounced for antiquarks than for quarks. This is a rather interesting result, since different groups give very different results on the antishadowing effect with large uncertainties.

A. V. Kotikov and A. V. Lipatov would like to thank School of Physics and Astronomy, Sun Yat-sen University (Zhuhai, China) for warm hospitality. P. M. Zhang

¹⁾e-mail: kotikov@theor.jinr.ru

was partially supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant # 12375084).

Funding. This work was supported by ongoing institutional funding. No additional grants to carry out or direct this particular research were obtained.

Conflict of interest. The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Shadowing and antishadowing in the rescaling model”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024601180

1. M. Arneodo, Phys. Rept. **240**, 301 (1994).
2. P. R. Norton, Rept. Prog. Phys. **66**, 1253 (2003).
3. K. Rith, Subnucl. Ser. **51**, 431 (2015).
4. S. Malace, D. Gaskell, D. W. Higinbotham, and I. Cloet, Int. J. Mod. Phys. E **23**(08), 1430013 (2014).
5. P. Zurita, arXiv:1810.00099 [hep-ph].
6. J. J. Aubert, G. Bassompierre, K. H. Becks et al. (European Muon Collaboration), Phys. Lett. B **123**, 275 (1983).
7. V. N. Gribov and L. N. Lipatov, Sov. J. Nucl. Phys. **15**, 438 (1972).
8. V. N. Gribov and L. N. Lipatov, Sov. J. Nucl. Phys. **15**, 675 (1972).
9. L. N. Lipatov, Sov. J. Nucl. Phys. **20**, 94 (1975).
10. G. Altarelli and G. Parisi, Nucl. Phys. B **126**, 298 (1977).
11. Y. L. Dokshitzer, Sov. Phys. JETP **46**, 641 (1977).
12. P. Paakkinen, arXiv:2211.08906 [hep-ph].
13. S. A. Kulagin and R. Petti, Nucl. Phys. A **765**, 126 (2006).
14. S. A. Kulagin and R. Petti, Phys. Rev. C **90**(4), 045204 (2014).
15. R. L. Jaffe, F. E. Close, R. G. Roberts, and G. G. Ross, Phys. Lett. B **134**, 449 (1984).
16. O. Nachtmann and H. J. Pirner, Z. Phys. C **21**, 277 (1984).
17. F. E. Close, R. L. Jaffe, R. G. Roberts, and G. G. Ross, Phys. Rev. D **31**, 1004 (1985).
18. F. E. Close, R. G. Roberts, and G. G. Ross, Phys. Lett. B **129**, 346 (1983).
19. R. L. Jaffe, Phys. Rev. Lett. **50**, 228 (1983).
20. S. A. Kulagin, EPJ Web Conf. **138**, 01006 (2017).
21. R. L. Jaffe, arXiv:2212.05616 [hep-ph].
22. A. V. Kotikov, B. G. Shaikhatdenov, and P. Zhang, Phys. Rev. D **96**(11), 114002 (2017).
23. A. Kotikov, B. Shaikhatdenov, and P. Zhang, EPJ Web Conf. **204**, 05002 (2019).
24. A. V. Kotikov, B. G. Shaikhatdenov, and P. Zhang, Phys. Part. Nucl. Lett. **16**(4), 311 (2019); arXiv:1811.05615 [hep-ph].
25. N. A. Abdulov, A. V. Kotikov, and A. V. Lipatov, Phys. Part. Nucl. Lett. **20**(4), 557 (2023).
26. N. A. Abdulov, A. V. Kotikov, and A. Lipatov, Particles **5**(4), 535 (2022).

Schwinger-like pair production of baryons in electric field

A. Gorsky*, A. Pikalov^{+*1)}

⁺Moscow Institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Russia

^{*}Institute for Information Transmission Problems, 127994 Moscow, Russia

Submitted 25 March 2024

Resubmitted 25 March 2024

Accepted 11 April 2024

DOI: 10.31857/S1234567824100033, EDN: GAEMHC

In this Letter we evaluate the probability rate for the Schwinger production of baryons in an external electric field in the worldline instanton approach in holographic QCD. The new exponentially suppressed processes in a constant electric field involving the composite worldline instantons are suggested which include the non-perturbative decay of a neutron into proton and charged meson and the spontaneous production of $p\bar{n}\pi^-$ and $n\bar{p}\pi^+$ states.

The worldline instanton method is similar to the one used in [1] to calculate the rate of Schwinger pair production and in [2] to describe monopole pair production in weak magnetic field. The holographic Schwinger effect has been discussed in the $N = 4$ SYM in [3] and has been extended for non-conformal backgrounds in [4–6] for the creation of the massive quark-antiquark pair.

We consider the approximation when baryon is the point-like solitonic object and we evaluate the action on the circular worldline instanton trajectory in the leading approximation. We neglect nucleon-antinucleon interaction due to massive mesons exchanges. In the Witten–Sakai–Sugimoto (WSS) model [7, 8] model at $T = 0$ the holographic background looks as the cigar-like geometry involving coordinates (u, τ) supplemented with sphere S^4 and four-dimensional Minkowski space-time. Corresponding metric is

$$ds^2 = \left(\frac{u}{R}\right)^{3/2} (\eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu + f(u) d\tau^2) + \left(\frac{R}{u}\right)^{3/2} \left(\frac{du^2}{f(u)} + u^2 d\Omega_4^2\right), \quad f(u) = 1 - \frac{u_k^3}{u^3}. \quad (1)$$

The flavor degrees of freedom are introduced by adding N_f $D8 - \bar{D}8$ branes extended along all coordinates but τ . Holographic baryon can be considered as the baryonic vertex with the N_c string attached [9]. In terms of the 5d Yang–Mills (YM) theory with the flavor gauge

group the baryon is the instanton solution localized in (z, x_1, x_2, x_3) coordinates.

Since we consider the baryon-antibaryon pair we encounter the new situation when some part of N_c strings can be long and connect instanton and antiinstanton. We shall consider three different situations when all strings from vertex are short, when all strings connect the instanton and antiinstanton and the case when only part of the strings are stretched between the instanton-antiinstanton pair. The production rate in the leading approximation reads as

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{M^2}{eE_{\text{eff}}}\right), \quad (2)$$

where effective electric field is $E_{\text{eff}} = E - kT_{\text{str}}$, k is the number of long strings. The process is possible only for $E_{\text{eff}} > 0$.

Consider the Schwinger effect for baryon involving a heavy quark. In WSS model the quark mass can be described as separation between the flavor $D8$ branes. The Schwinger process probability in the weak field limit is

$$w \sim e^{-S} = \exp\left(-\frac{\pi M_1^2}{qE} + A\frac{qE}{M_1}\right), \quad (3)$$

where u_q is the brane radial coordinate and $A = \frac{g_{YM}^2 N_c}{4\pi M_{kk}} \ln\left(\frac{\alpha u_q}{u_k}\right)$.

We suggest the non-perturbative process in which the neutron decays into a proton and charged meson, π^- -meson or ρ^- -meson, and then charged meson weakly decays into the final state, see Fig. 1 for corresponding instanton trajectory.

The action evaluated at the saddle point world-line instanton solution reads as

$$S_{\text{inst}} = m_\pi L_\pi + M_p L_p - eE(\text{Area}) - M_n H, \quad (4)$$

where L_π, L_p are the lengths of the corresponding segments of proton and meson trajectories and H is the distance between the junction points in Euclidean time

¹⁾e-mail: arseniy.pikalov@phystech.edu

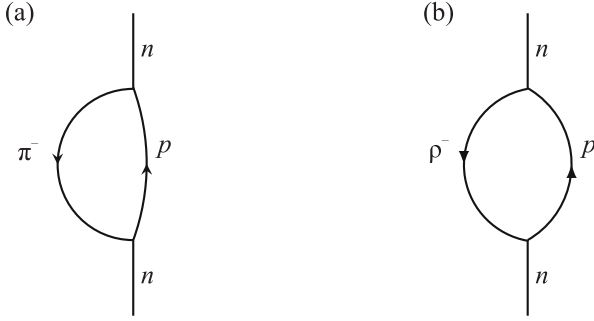


Fig. 1. Bounce for the neutron decay: (a) – via π^- channel; (b) – via ρ^- channel

t_E . In the leading approximation taking into account that $m_\pi \ll M_p$ the action can be approximated by

$$S_{\text{inst}}^0 \propto \frac{m_\pi^2}{2eE}. \quad (5)$$

More accurate saddle-point action for the composite worldline instanton when the ρ -meson propagates in the composite worldline instanton is

$$S_{\text{inst}} = \frac{m_\rho^2}{eE} \arccos \frac{M_n^2 + m_\rho^2 - M_p^2}{2m_\rho M_n} + \frac{M_p^2}{eE} \arccos \frac{M_n^2 - m_\rho^2 + M_p^2}{2M_p M_n} - \frac{m_\rho M_n}{eE} \sqrt{1 - \left(\frac{M_n^2 + m_\rho^2 - M_p^2}{2m_\rho M_n} \right)^2}. \quad (6)$$

Consider the following composite worldline instanton: the proton-antiproton trajectory gets started at some initial point, there is the junction at which proton trajectory gets glued with the neutron and π^+ trajectories. In the case of π^- involved into the composite instanton the deformed segment of the circle is small hence the probability in the leading approximation has the form

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{M_p^2}{eE}\right). \quad (7)$$

If the ρ^- is involved in the composite instanton the trajectory is modified and the probability reads as

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{\pi(M_p^2 + m_\rho^2)}{eE} - \frac{M_p M_n}{eE} \times \sqrt{1 - \left(\frac{M_p^2 - m_\rho^2 + M_n^2}{2M_p M_n}\right)^2} + \frac{M_p^2}{eE} \times \arccos \frac{M_p^2 - m_\rho^2 + M_n^2}{2M_p M_n} + \frac{m_\rho^2}{eE} \arccos \frac{m_\rho^2 - M_p^2 + M_n^2}{2m_\rho M_n}\right). \quad (8)$$

At $t_E = 0$ the solution gets rotated from the Euclidean to Minkowski space-time. The final state involves the antiproton, neutron and meson with the positive charge.

Funding. This work was supported by ongoing Institute for Information Transmission Problems and Moscow Institute of Physics and Technology funding. No additional grants to carry out or direct this particular research were obtained.

Conflict of interest. The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Schwinger-like pair production of baryons in electric field”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600824

1. I. K. Affleck, O. Alvarez, and N. S. Manton, Nucl. Phys. B **197**, 509 (1982).
2. I. K. Affleck and N. S. Manton, Nucl. Phys. B **194**, 38 (1982).
3. G. W. Semenoff and K. Zarembo, Phys. Rev. Lett. **107**, 171601 (2011).
4. Y. Sato and K. Yoshida, J. High Energy Phys. **013**, 1 (2013).
5. D. Kawai, Y. Sato, and K. Yoshida, Int. J. Mod. Phys. A **30**, 1530026 (2015).
6. M. Ghodrati, Phys. Rev. D **92**, 065015 (2015).
7. E. Witten, Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 505 (1998).
8. T. Sakai and S. Sugimoto, Progress of Theoretical Physics **113**, 843 (2005).
9. E. Witten, J. High Energy Phys. **1998**, 006 (1998).

Преобразование частоты фемтосекундного импульса титан-сапфирового лазера в длинноволновую область среднего ИК диапазона в кристалле $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$

И. О. Киняевский¹⁾, А. В. Корибут, Я. В. Грудцын, М. В. Ионин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 апреля 2024 г.

После переработки 4 апреля 2024 г.

Принята к публикации 13 апреля 2024 г.

Экспериментально продемонстрирована генерация ультракоротких импульсов среднего ИК диапазона (длина волны от 8.5 до 10.5 мкм) с высокой энергией (до 4.5 мкДж) путем генерации разностной частоты в кристалле $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$ при его накачке импульсами титан-сапфирового лазера длительностью 100 фс и длиной волны 0.95-мкм. Для таких импульсов накачки определены порог оптического повреждения и коэффициент двухфотонного поглощения $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$. Эффективность преобразования частоты достигла 0,24 % при энергии импульса накачки 1.85 мДж, которая уменьшалась при большей энергии. Оценки показывают, что применение широкоапертурного (диаметром 15 мм) образца $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$ позволит увеличить энергию импульса накачки до ~ 10 мДж и, соответственно, увеличить энергию импульса среднего инфракрасного диапазона до 24 мкДж при той же эффективности.

DOI: 10.31857/S1234567824100045, EDN: NQKXFV

Разработка фемтосекундных лазерных источников, действующих в длинноволновой области среднего инфракрасного (ИК) диапазона (длина волны 6–12 мкм), представляет большой интерес для многих фундаментальных и прикладных задач, таких как ускорение частиц [1], генерация аттосекундных импульсов [2], дистанционный газовый анализ [3], модификация кристаллов [4], инактивация болезнетворных бактерий [5] и других. Один из основных способов генерации фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК диапазона является преобразование спектра надежных лазеров ближнего ИК-диапазона в нелинейных кристаллах посредством генерации разностной частоты (ГРЧ) или оптической параметрической генерации (ОПГ) [6–11]. По большей части такие системы основаны на лазере с высокой частотой повторения импульсов, которая обеспечивает относительно высокую среднюю мощность излучения при малой пиковой мощности/энергии импульсов [7–9]. Следовательно, энергия генерируемых фемтосекундных импульсов среднего ИК-диапазона в этом случае невелика, на уровне пико- [9] или нано-Дж [7]. Наша работа направлена на разработку фемтосекундной лазерной системы среднего инфракрасного диапазона с энергией импульса на уровне несколь-

ких мкДж, пиковая мощность которого достигнет критической мощности самофокусировки для материалов среднего ИК диапазона (десятки МВт). Поэтому в качестве базового лазера мы выбрали фемтосекундный титан-сапфировый лазер, чей уровень технологического развития позволяет получать лазерные импульсы мощностью до 10 ПВт [12].

В качестве нелинейного кристалла мы выбрали перспективный недавно разработанный кристалл $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$ (BGGSe) [13, 14], который обладает хорошей прозрачностью в среднем ИК-диапазоне, высокой нелинейностью, благоприятной дисперсией и высоким порогом оптического повреждения. Подробную характеристику линейных и нелинейных оптических свойств BGGSe можно найти в [13, 14]. В последнее время этот материал был успешно использован для преобразования частоты фемтосекундных [9] и наносекундных [10] лазерных импульсов ближнего ИК диапазона, а также для широкополосного преобразования микросекундных импульсов СО-лазера [11]. Наш образец BGGSe размером $7 \times 7 \times 0.6$ мм³ был выращен Д. В. Бадиковым и В. В. Бадиковым в Лаборатории новейших технологий Кубанского государственного университета. Образец был обрезан под углами $\theta = 29^\circ$, $\phi = 42.7^\circ$ для I-типа фазового синхронизма (ФС). Для сравнения мы также рассмотрели традиционный кристалл AgGaS_2 (AGS) как эталон-

¹⁾e-mail: kinyaevskiyio@lebedev.ru

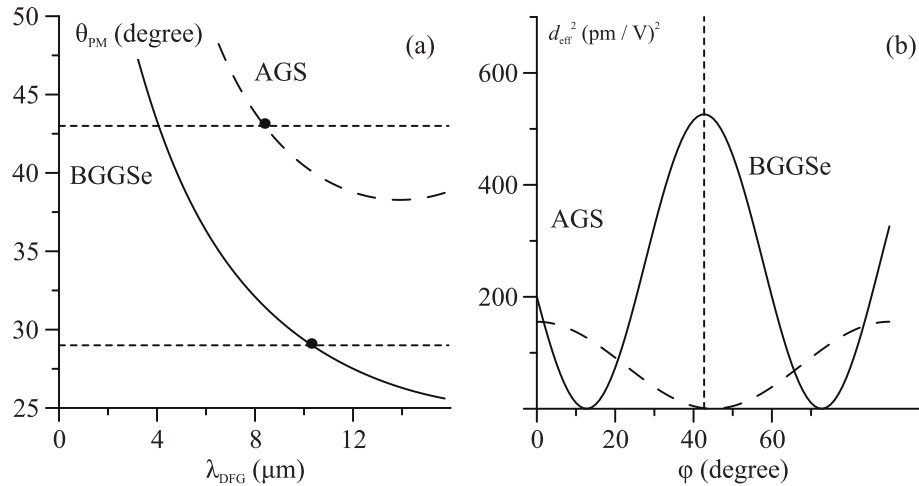


Рис. 1. Рассчитанные углы ФС (а) и квадрат эффективной нелинейности (б) для ГРЧ в кристаллах BGGSe (сплошная линия) и AGS (штриховая линия)

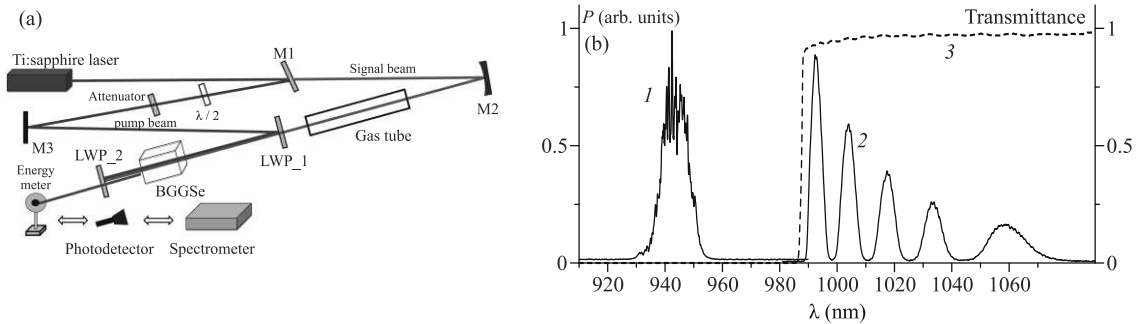


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Оптическая схема эксперимента, см. текст для получения подробной информации; (б) – спектры импульсов накачки (1) и сигнальной волны (2) и пропускание фильтра LWP_1 (3)

ный материал. Образец AGS размером $7 \times 8 \times 2$ мм³, выращенный в Институте Геологии и минералогии СО РАН, был вырезан под углами $\theta = 43^\circ$, $\phi = 0^\circ$ для II-типа ФС. Следует отметить, что BGGSe и AGS имеют близкую величину запрещенной зоны: 2.38 эВ [13] и 2.62 эВ [15] соответственно.

Рассчитанные углы ФС для ГРЧ между импульсным титан-сапфировым лазером ($\lambda = 0.95$ мкм) и широкополосным излучением ближнего ИК-диапазона ($\lambda = 1.0\text{--}1.2$ мкм) представлены на рис. 1а: I-тип ФС ($o - e \rightarrow e$) для BGGSe и II-тип ФС ($e - o \rightarrow e$) для AGS. Расчет угла ФС является “стандартной” процедурой, которую можно найти, например, в справочнике [15]. Дисперсионные уравнения для кристаллов BGGSe и AGS были взяты из [14] и [15], соответственно. Кроме того, квадрат эффективной нелинейности в зависимости от азимутального угла ϕ был рассчитан и представлен на рис. 1б. Для BGGSe эффективная нелинейность была рассчитана как $d_{eff} = (d_{11} \sin 3\phi + d_{22} \cos 3\phi) \cos 2\theta$, где $d_{11} = 23.6$ пм/В, $d_{22} = -18.5$ пм/В [14]. Для AGS она рассчитыва-

лась как $f_{def} = d_{36} \sin 2\theta \cos 2\phi$, где $d_{36} = 12.5$ пм/В [15]. Рисунок 1 показывает, что угол среза нашего образца BGGSe соответствует длине волны ГРЧ 10 мкм, а угол среза AGS соответствует длине волны ГРЧ 8 мкм. Угол ϕ оптимизирован для обоих кристаллов. Квадрат эффективной нелинейности для BGGSe оказался 3.4 раз выше, чем у AGS и, соответственно, BGGSe должен быть в 3.4 раза эффективнее.

Оптическая схема нашего эксперимента представлена на рис. 2а. Мы использовали титан-сапфировый лазер “СТАРТ-480М” (ООО “Авеста Проект”, Россия) с энергией импульса до 10 мДж, центральная длина волны $\lambda \approx 0.95$ мкм, спектральная ширина на полувысоте ~ 12 нм, длительность импульса 100 фс, частота повторения импульсов – 10 Гц. Лазерный луч разделялся на два плеча с помощью частично пропускающего зеркала (M1). Отраженный луч с высокой энергией импульса ($E \approx 9.3$ мДж) был использован как волна накачки кристалла, прошедший луч с меньшей энергией ($E \approx 0.7$ мДж) как

сигнальная волна. Энергия импульса накачки регулировалась управляемым дифракционным ослабителем. Поляризация волны накачки была повернута на 90° с помощью полуволновой пластинки, потому что она должна соответствовать обыкновенной волне в BGGSe (при использовании кристалла AGS поляризация сигнальной волны была повернута на 90°). Луч сигнальной волны фокусировался сферическим зеркалом (M2, фокусное расстояние 2 м) в газовую трубку длиной 1.46 м, наполненную CO_2 при давлении 3 атм. В газовой трубе спектр лазерного импульса уширялся из-за эффекта фазовой самомодуляции в филаменте. Затем, импульсы волны накачки и сигнальной волны объединялись. Согласование импульсов по времени осуществлялось путем контроля длины плеча для импульса накачки регулировкой положения зеркала M3. Пространственное сведение осуществлялось фильтром LP02-980RU-25 (Semrock, США), LWP_1 на рис. 2а. Фильтр имел коэффициент отражения $> 99.9\%$ для излучения накачки и пропускание $> 95\%$ для излучения сигнальной волны. Спектры излучения накачки и сигнальной волны после фильтра представлены на рис. 2б, вместе с коэффициентом пропускания фильтра. После фильтра энергия импульса сигнальной волны составляла 0.15 мДж, энергия импульса накачки могла достигать ~ 9 мДж.

Комбинированный лазерный импульс был направлен в нелинейный кристалл (BGGSe или AGS) без какой-либо фокусировки, диаметр пучка накачки и сигнального импульсов составили 4.1 мм и 4.5 мм на уровне $1/e^2$, соответственно. Импульс излучения среднего ИК диапазона, генерируемый в нелинейном кристалле, отделялся от излучения ближнего ИК-диапазона фильтром (# 5 из комплекта фильтров ИК-спектрометра ИКС-31, ЛОМО, Россия), LWP_2 на рис. 2а. Фильтр имел коэффициент пропускания 50 % для длин волн 5–14 мкм и абсолютно подавлял излучение ближнего ИК-диапазона. Излучение ГРЧ регистрировалось фотоприемником РЕМ-L-3 (VIGO Systems, Польша), спектры измерялись с помощью самодельного спектрометра на основе дифракционной решетки с 75 штр/мм оснащенного фотоприемником РЕМ-L-3, средняя энергия импульсов ГРЧ измерялась с помощью измерителя мощности Ophir-3A.

Сначала была найдена оптимальная ориентация кристаллов. Зависимость мощности/энергии импульса ГРЧ от угла падения (α) на кристалл BGGSe представлена на рис. 3. Этот угол был пересчитан в угол θ между волновым вектором излучения накачки и оптической осью кристалла, верхняя ось x

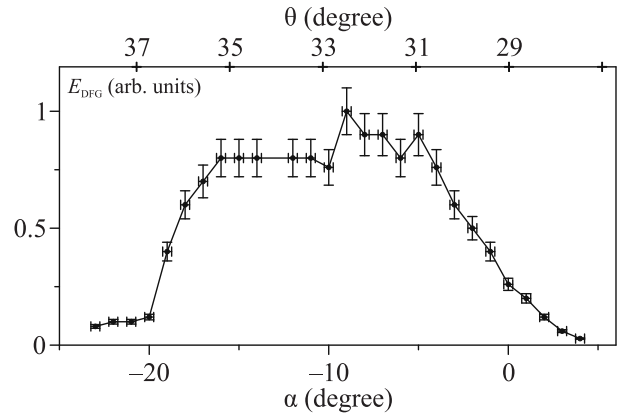


Рис. 3. Зависимость энергии импульса ГРЧ от угла падения излучения на кристалл BGGSe (α), верхняя ось X – угол ФС (θ)

на рис. 3. Зависимость на рис. 3 имеет плато при $\theta = 30^\circ - 36^\circ$, что согласно рис. 1а соответствует перестройке длины волны ГРЧ от 7.5 мкм до 10.5 мкм, меньший θ соответствует большей длине волны. Падение мощности ГРЧ при $\theta \leq 29^\circ$ может быть связано с уменьшением соотношения Мэнли–Роу при сдвиге спектра ГРЧ в сторону более длинных волн. Падение энергии ГРЧ при $\theta \geq 36^\circ$ было связано со сдвигом спектра ГРЧ в сторону более коротких длин волн, что требовало излучения с длиной волны $\lambda > 1070$ нм, где мощность излучения сигнальной волны имела заметное уменьшение (см. рис. 2б).

Далее измерялась относительная энергия импульса ГРЧ (амплитуда сигнала на фотодетекторе) в зависимости от энергии импульса накачки при оптимальном положении образцов ($\alpha = -10^\circ$ для BGGSe и $\alpha = -14^\circ$ для AGS), см. рис. 4. С увели-

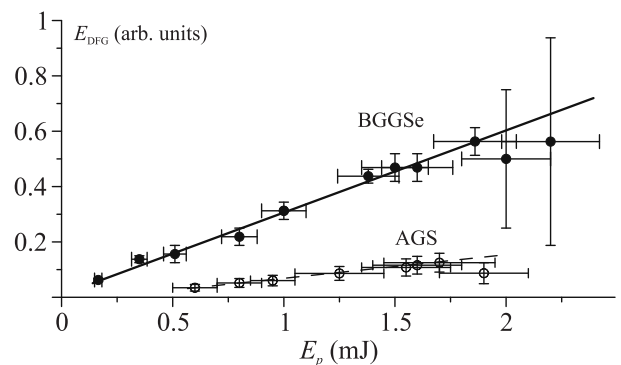


Рис. 4. Относительная энергия импульса ГРЧ в зависимости от энергии импульса накачки при оптимальном положении кристаллов BGGSe и AGS

чением энергии до определенного значения эта зависимость имела линейный характер для обоих кри-

сталлов, что согласуется с теорией параметрического преобразования частоты (см., например, [15]). Кристалл BGGSe оказался примерно в 5 раз эффективнее AGS. В BGGSe при высокой энергии импульса накачки $E_p \geq 2$ мДж, амплитуда сильнейших импульсов ГРЧ возрастала, однако их стабильность и воспроизводимость становилась низкой, что привело к снижению их средней энергии. Явное оптическое повреждение поверхности образца BGGSe наблюдалось при $E_p \approx 2.5$ мДж, что соответствует плотности энергии 0.04 Дж/см² и интенсивности 0.4 ТВт/см². Следует отметить, что снижение средней энергии импульса ГРЧ наблюдалось также в кристалле AGS при $E_p \approx 1.8$ мДж.

Природа нестабильности ГРЧ при высокой энергии накачки на данный момент для нас не ясна. Одна из причин может быть связана с нелинейным поглощением и образованием плазмы в кристалле, что вызывает отражение/рассеяние/поглощение длинноволнового излучения среднего ИК-диапазона. Зависимость коэффициента пропускания BGGSe от энергии импульса накачки представлена на рис. 5. Даже

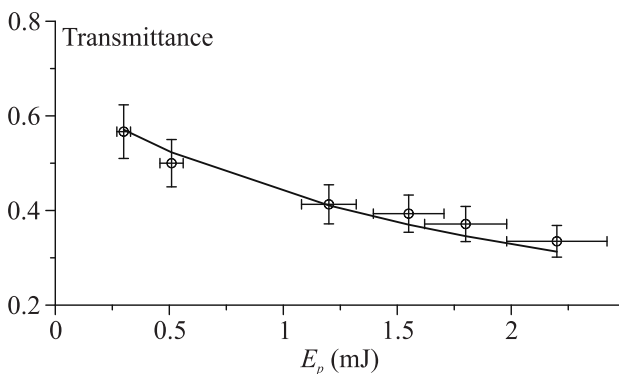


Рис. 5. Зависимость пропускания кристалла BGGSe от энергии импульса накачки

при $E_p = 0.25$ мДж коэффициент пропускания заметно ниже, чем тот, который определяется только Френелевским отражением (70 %). При $E_p = 2$ мДж коэффициент пропускания уменьшился до ~ 35 %. Линия на рис. 5 соответствует пропусканию образца BGGSe рассчитанному при коэффициенте двухфотонного поглощения $\beta = 0.25$ см/ГВт, который обеспечивает наилучшее согласие с экспериментом. Эта величина оказалась в 5–10 раз меньше, чем представленная в [14].

Чтобы измерить абсолютное значение энергии импульса ГРЧ использовался измеритель мощности Ophir-3A. Средняя энергия определялась как отношение средней мощности ГРЧ к частоте повторения импульсов (10 Гц) с учетом пропускания фильтра

LWP_2. Средняя энергия импульса ГРЧ, полученная с помощью BGGSe при $E_p = 1.85$ мДж, составила 4.5 ± 0.5 мкДж. Эта энергия соответствует эффективности преобразования 0.24 %, что сопоставимо с результатами, полученными с другими лазерами с высокой частотой повторения импульсов, например [9]. Учитывая возможность увеличить энергию импульса накачки нашей установки до ~ 10 мДж, энергия импульса ГРЧ может быть увеличена до ~ 24 мкДж при той же эффективности преобразования, однако, это потребует использования широкоапертурного образца BGGSe диаметром ~ 15 мм. Отметим, что средняя энергия импульса ГРЧ в AGS достоверно не измерена из-за ее низкой величины.

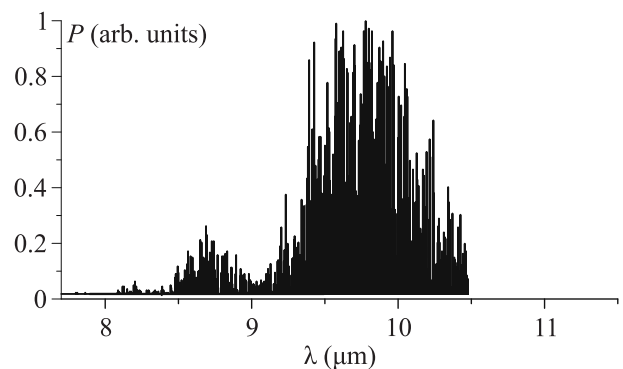


Рис. 6. Спектр импульса ГРЧ, полученный в кристалле BGGSe при $\alpha = -10^\circ$

Спектр импульса ГРЧ, полученный в BGGSe при оптимальных условиях ($\alpha = -10^\circ$, при $E_p = 1.85$ мДж) представлен на рис. 6. Спектр измерялся импульс за импульсом при медленном вращении дифракционной решетки самодельного спектрометра. Спектр импульса ГРЧ простирался от 8.5 мкм до 10.5 мкм (по уровню 0.1 от максимальной мощности), что согласуется с результатами работы [9], где сообщается о применимости BGGSe для получения импульсов среднего ИК-диапазона длительностью в несколько периодов поля. Однако спектр ГРЧ имел побочный максимум на длине волны 8.7 мкм, возникший из пиковой структуры спектра импульса сигнальной волны (см. рис. 2b). Поэтому для оптимизации формы спектра ГРЧ, спектр импульса сигнальной волны должен иметь более однородную форму.

Таким образом, нами реализована и исследована ГРЧ лазерных импульсов длительностью 100 фс, длиной волны 0.95 мкм и энергия свыше 1 мДж в кристалле BGGSe. Оптическое повреждение BGGSe наблюдалось при плотности энергии 0.04 Дж/см². Измеренный коэффициент двухфотонного поглощения составил 0.25 ± 0.05 см/ГВт. Сгенерированные

ультракороткие импульсы среднего ИК диапазона имели энергию до 4.5 мкДж и простирались в диапазоне длин волн от 8.5 мкм до 10.5 мкм. Принимая во внимание длительность импульса накачки 100 фс, эта энергия соответствует пиковой мощности 45 МВт, что превышает критическая мощность самофокусировки в твердых телах, например, в ZnSe [16]. Поэтому такие лазерные импульсы могут быть использованы для изучения филаментации в среднем ИК-диапазоне. Другое применение этой лазерной системы – использование ее в качестве задающего генератора для CO₂-лазерного усилителя высокого давления [17]. Необходимо отметить, что представленная схема ГРЧ относительно проста и имеет большой потенциал для масштабирования энергии, путем увеличения энергетики исходного титан-сапфирового лазера (вплоть до сотен джоулей [12]), однако в этом случае потребуется разработка широкоапертурных образцов BGGSe.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-79-10068, <https://rscf.ru/project/22-79-10068/>.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. K. Pogorelsky, I. Ben-Zvi, W. D. Kimura, N. A. Kurnit, and F. Kannari, *Infrared Phys. Technol.* **36**, 341 (1995).
2. C. Hernández-García, T. Popmintchev, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, L. Plaja, A. Becker, and A. Jaron-Becker, *Opt. Express* **25**, 11855 (2017).
3. A. A. Lanin, A. A. Voronin, A. B. Fedotov, and A. M. Zheltikov, *Nature* **4**, 6670 (2014).
4. N. A. Smirnov, Y. S. Gulina, N. I. Busleev, P. P. Pakholchuk, A. V. Gorevoy, V. G. Vins, and S. I. Kudryashov, *JETP Lett.* **119**, 411 (2024).
5. V. O. Kompanets, S. I. Kudryashov, E. R. Totordava, S. N. Shelygina, V. V. Sokolova, I. N. Saraeva, M. S. Kovalev, A. A. Ionin, and S. V. Chekalin, *JETP Lett.* **113**, 365 (2021).
6. I. O. Kinyaevskiy, A. A. Koribut, L. V. Seleznev, Yu. M. Klimachev, E. E. Dunaeva, and A. A. Ionin, *Opt. Laser Technol.* **169**, 110035 (2024).
7. R. T. Murray, T. H. Runcorn, E. J. R. Kelleher, and J. R. Taylor, *Opt. Lett.* **41**, 2446 (2016).
8. Y. Cui, H. Huang, Y. Bai, W. Du, M. Chen, B. Zhou, I. Jovanovic, and A. Galvanauskas, *Opt. Lett.* **48**, 1890 (2023).
9. U. Elu, L. Maidment, L. Vamos, T. Steinle, F. Haberstroh, V. Petrov, V. Badikov, D. Badikov, and J. Biegert, *Opt. Lett.* **45**, 3813 (2020).
10. W. Chen, L. Wang, I. B. Divliansky, V. Pasiskevicius, O. Mhibik, K. M. Moelster, A. Zukauskas, L. B. Glebov, and V. Petrov, *Opt. Express* **32**, 1728 (2024).
11. A. A. Ionin, I. O. Kinyaevskiy, Yu. M. Klimachev, A. A. Kotkov, A. Yu. Kozlov, A. M. Sagitova, D. V. Sinitsyn, V. V. Badikov, and D. V. Badikov, *Opt. Laser Technol.* **115**, 205 (2019).
12. W. Li, Z. Gan, L. Yu et al. (Collaboration), *Opt. Lett.* **43**, 5681 (2018).
13. V. V. Badikov, D. V. Badikov, V. B. Laptev, K. V. Mitin, G. S. Shevyrdyaeva, N. I. Shchebetova, and V. Petrov, *Opt. Mater. Express* **6**, 2933 (2016).
14. N. Kostyukova, E. Erushin, A. Boyko, G. Shevyrdyaeva, and D. Badikov, *Photonics* **11**, 281 (2024).
15. V. G. Dmitriev, G. G. Gurzadyan, and D. N. Nikogosyan, *Handbook of nonlinear optical crystals*, Springer (2013).
16. G. N. Patwardhan, J. S. Ginsberg, C. Y. Chen, M. M. Jadidi, and A. L. Gaeta, *Opt. Lett.* **46**, 1824 (2021).
17. M. N. Polyanskiy, I. V. Pogorelsky, M. Babzien, and M. A. Palmer, *OSA Contin* **3**, 459 (2020).

Генерация третьей гармоники в плазмонных метаповерхностях, изготовленных методом прямой фемтосекундной лазерной печати

Д. В. Павлов⁺, А. Б. Черепашин⁺, А. Ю. Жижченко⁺, А. А. Сергеев^{†*}, Е. В. Мицай⁺, А. А. Кучмижак^{+×1)},
С. И. Кудряшов^{°1)}

⁺Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, 690041 Владивосток, Россия

^{*}The Hong Kong University of Science and Technology, 999077 Hong Kong SAR, China

[×]Дальневосточный федеральный университет, 690041 Владивосток, Россия

[°]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 апреля 2024 г.

После переработки 12 апреля 2024 г.

Принята к публикации 13 апреля 2024 г.

Метод прямой безабляционной фемтосекундной лазерной печати был использован для изготовления метаповерхности в виде упорядоченных массивов полых нановыпуклостей на поверхности тонкой пленки золота. Наличие резонансных провалов в спектрах отражения изготовленных метаповерхностей, а также 100-кратное резонансное усиление интенсивности генерации третьей гармоники при спектральном согласовании наблюдаемых оптических резонансов структуры и длины волны накачки основной гармоники указывает на наличие в таких упорядоченных наноструктурах высокодобротных коллективных плазмонных резонансов, связанных с возбуждением и деструктивной интерференцией плазмон-поляритонных волн.

DOI: 10.31857/S1234567824100057, EDN: PDFVGM

1. Явление возбуждения индуцированных внешним электромагнитным полем резонансных колебаний электронной плотности на границе металл–диэлектрик, так называемых поверхностных плазмон-поляритонных (ПП) волн, широко применяется в передовых оптоэлектронных и сенсорных устройствах для усиления взаимодействия оптического излучения с веществом на наномасштабе [1–3]. Такие колебания могут поддерживаться как единичными наноструктурами, как правило, изготовленными из благородных металлов (локализованные плазмонные резонансы), так и возбуждаться в специальном образом спроектированных массивах таких наноструктур, часто называемых метаповерхностями. Когерентное согласование рассеянных на наноструктурах электромагнитных волн, с бегущими и локализованными в наноструктурах ПП волнами позволяет частично компенсировать, за счет интерференционного подавления радиационных потерь, высокие омические потери в используемых металлах, обеспечивая возбуждение коллективных плазмонных мод с высокой добротностью [4]. К таким типам мод можно отнести так называемые квази-связанные состояния в континууме (КССК), возможность возбужде-

ния которых в плазмонных наноструктурах, а также практического использования ряда передовых задач в нелинейной оптике, наноплазмонике и сенсорике активно исследуется в последние годы [5–9]. Вместе с тем, практическое использование поддерживающих высокодобротные моды плазмонных метаповерхностей, очевидно, уже в ближайшем будущем потребует наличия масштабируемых и эффективных методов изготовления и тиражирования, остающегося прерогативой дорогостоящих многостадийных литографических методов.

В данной работе сообщается об изготовлении плазмонных метаповерхностей поддерживающей высокодобротные коллективные моды в ближней ИК области спектра, методом безабляционной фемтосекундной лазерной печати. Наличие указанных мод подтверждается сравнительными результатами исследования оптических (инфракрасная (ИК) Фурье-спектроскопия) и нелинейно-оптических (генерация третьей гармоники, ГТГ) свойств изготовленных наноструктур.

2. Изготовление упорядоченных массивов нановыпуклостей осуществлялось с использованием метода прямой фс лазерной печати на поверхности тонких (толщиной 50 нм) пленок золота, нанесенных на стеклянные подложки методом термического оса-

¹⁾e-mail: alex.iacp.dvo@mail.ru; sikudr@lebedev.ru

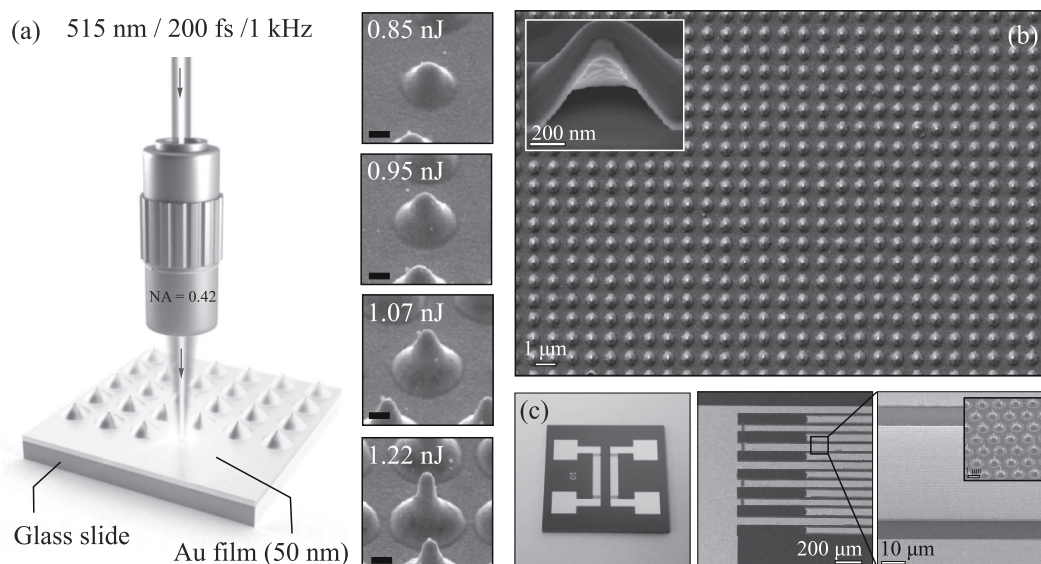


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое изображение процесса изготовления плазмонных метаповерхностей методом безабляционной фемтосекундной лазерной печати на поверхности тонких пленок золота (слева), а также серия СЭМ-изображений, иллюстрирующих эволюцию геометрии единичной нановыпуклости при увеличении энергии в импульсе E от 0.85 до 1.22 нДж. Масштабная метка – 200 нм. (б) – СЭМ-снимок упорядоченного массива нановыпуклостей, изготовленных при $E = 1.22$ нДж и межструктурным расстоянием $d = 1$ мкм. (с) – Оптическое (слева), а также СЭМ-изображения поверхности встречно-щелевых золотых электродов на кремниевой подложке с записанными на них массивами плазмонных нановыпуклостей

ждения в вакууме со скоростью 0.7 нм/с. Излучение второй гармоники (515 нм) фс-лазерного Yb:KGW-источника (Pharos, Light Conversion; 200 фс, 1 КГц) фокусировалось на поверхность золотой пленки объективом с числовой апертурой $NA = 0.42$, обеспечивая возможность контролируемой печати массивов нановыпуклостей с минимальным периодом до $d = 0.9$ мкм по принципу один импульс – одна структура. Развертка лазерного пучка по поверхности пленки осуществлялась при помощи системы линейных нанопозиционеров (Aerotech), обеспечивающих возможность перемещения мишени с золотой пленкой с точностью до 0.12 мкм (рис. 1а). Энергия в импульсе (E) контролировалась с помощью фотоприемника и варьировалась в диапазоне от 0.7 до 2 нДж, обеспечивая вариацию геометрической формы нановыпуклостей.

Типичный снимок сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), иллюстрирующий морфологию поверхности золотой пленки с напечатанным массивом нановыпуклостей (размером 300×300 мкм² при $d = 1$ мкм) приведен на рис. 1б, демонстрируя высокую воспроизводимость геометрии отдельных структур в массиве. Во многом, это связано с отсутствием при формировании нановыпуклостей абляционного выноса материала в виде расплавленных наночастиц и их последующего переосаждения на поверхность

пленки. С учетом использованной частоты следования импульсов в 1 КГц, процесс изготовления занимает не больше 2-х минут и может быть существенно ускорен при использовании более высокочастотных лазерных источников в сочетании с методами мультиплексирования лазерных пучков. Нановыпуклости имеют полую геометрию, что подтверждается результатами СЭМ-визуализации поперечных разрезов отдельных структур, изготовленных с использованием сфокусированного ионного пучка (вставка на рис. 1б). Формирование таких полых наноструктур происходит вследствие акустической релаксации локального расплавленного под действием лазерного облучения участка золотой пленки и его последующей рекристаллизации [10–12]. Энергия вложенного в пленку лазерного импульса позволяет контролировать геометрию наноструктур, варьирующуюся от небольших нановыпуклостей параболической формы (при E несколько выше порога модификации пленки $E_{th} = 0.7$ нДж) до высокоаспектных нано-острий (при $E > 1.2$ нДж), как показано на серии СЭМ-снимков на вставке рис. 1а. Метод фс-лазерной печати обеспечивает возможность прецизионной поточечной нанофабрикации массивов нановыпуклостей контролируемой геометрии и периода с высокой точностью и повторяемостью (стабильность энергии в импульсе для использованного лазерного источника

составляет 0.5 %) даже на мишенях с нетривиальной геометрией. В качестве примера, на рис. 1с приведен результат формирования различных массивов нановыпуклостей на поверхности встречно-щелевых контактов из золота, нанесенных через маску на поверхность объемной монокристаллической кремниевой подложки со слоем диоксида кремния толщиной 0.1 мкм.

3. Упорядоченные массивы нановыпуклостей поддерживают возбуждение и деструктивную интерференцию когерентных колебаний свободных электронов (или ПП волн), которые можно идентифицировать в ближнем и среднем ИК диапазонах по характерным провалам, наблюдаемым в спектрах отражения указанных структур [13–15]. Проведенные в работе [16] численные расчеты локальной структуры электромагнитных полей вблизи поверхности массива нановыпуклостей при их резонансном возбуждении, а также результаты моделирования модового состава таких структур указывают, что наблюдаемый резонансный плазмонный отклик может быть связан с возбуждением высокодобротных мод типа квази-связанных состояний в континууме (КССК). Частично данный факт подтверждается наблюдаемым нетривиальным поведением резонансного отклика, наблюдаемого в эксперименте при одновременной вариации периода расположения нановыпуклостей в массиве d , а также их геометрии. В частности, для фиксированной геометрии нановыпуклостей положение наблюдаемого на длине волны λ_R резонанса ожидаемо линейно масштабируется с периодом расположения наноструктур в массиве d , что является типичным при возбуждении коллективных плазмонных мод в периодических структурах [4]. Вместе с тем, при фиксированном периоде d , описанная выше эволюция геометрии наноструктур, достигающаяся за счет увеличения вложенной энергии в импульсе E (как показано на рис. 1а), также приводит к существенному смещению наблюдаемого резонансного отклика в сторону больших длин волн. Это указывает на существенный вклад геометрии единичных структур, поддерживающих собственные локализованные плазмонные моды, как на эффективность возбуждения/интерференции ПП волн, так и на спектральное положение наблюдаемого резонанса. Две серии Фурье-ИК спектров отражения (Bruker, Vertex 70v и Hyperion 1000) массивов (размером 300×300 мкм²) золотых нановыпуклостей (рис. 2а, б), изготовленных при фиксированной $E = 0.85$ нДж и $d = 0.9$ – 1.2 мкм, а также фиксированном $d = 0.9$ мкм и $E = 0.85$ – 1.22 нДж, иллюстрируют описанные тренды, указывая на

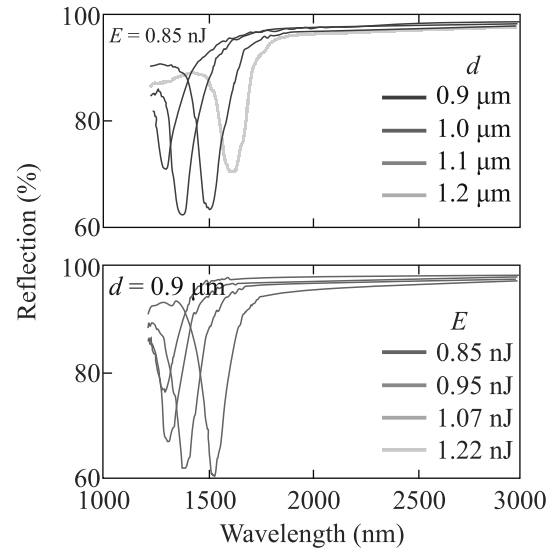


Рис. 2. (Цветной онлайн) Серия спектров Фурье-ИК отражения, измеренных от серии плазмонных метаповерхностей размером 300×300 мкм², изготовленных при фиксированной энергии в импульсе $E = 0.85$ нДж и варьирующемся периоде расположения структур в массиве $d = 0.9$ – 1.2 мкм (верхняя панель), а также фиксированном периоде $d = 0.9$ мкм и варьирующейся энергией $E = 0.85$ – 1.22 нДж (нижняя панель)

необходимость согласования спектрального положения локальных (геометрических) плазмонных резонансов, определяемых геометрией единичных нановыпуклостей, и характерного расстояния d между ними для обеспечения детектирования интенсивного резонансного отклика. Следует отметить, что при таком согласовании характерная амплитуда наблюдаемого в спектре Фурье-ИК отражении резонанса достигает 40 % при добротности $\sim \lambda_R/\Delta\lambda \approx 10$ – 13 ($\Delta\lambda$ – спектральная полуширина провала). Систематические исследования оптических свойств метаповерхностей, изготовленных при одинаковых параметрах, указывают на воспроизводимость спектрального положения коллективного резонанса с точностью ± 25 нм при вариации его амплитуды в пределах ± 3 %.

4. Резонансное возбуждение ПП сопровождается локализацией и усилением амплитуды электромагнитных полей вблизи поверхности плазмонных нановыпуклостей. Наличие таких полей подтверждается проведенными ранее результатами численного моделирования [16], а также экспериментально продемонстрированным усилением спонтанной эмиссии нанесенного на массив структур нанослоя квантовых точек теллурида ртути при спектральном согласовании спектра эмиссии и коллективного резо-

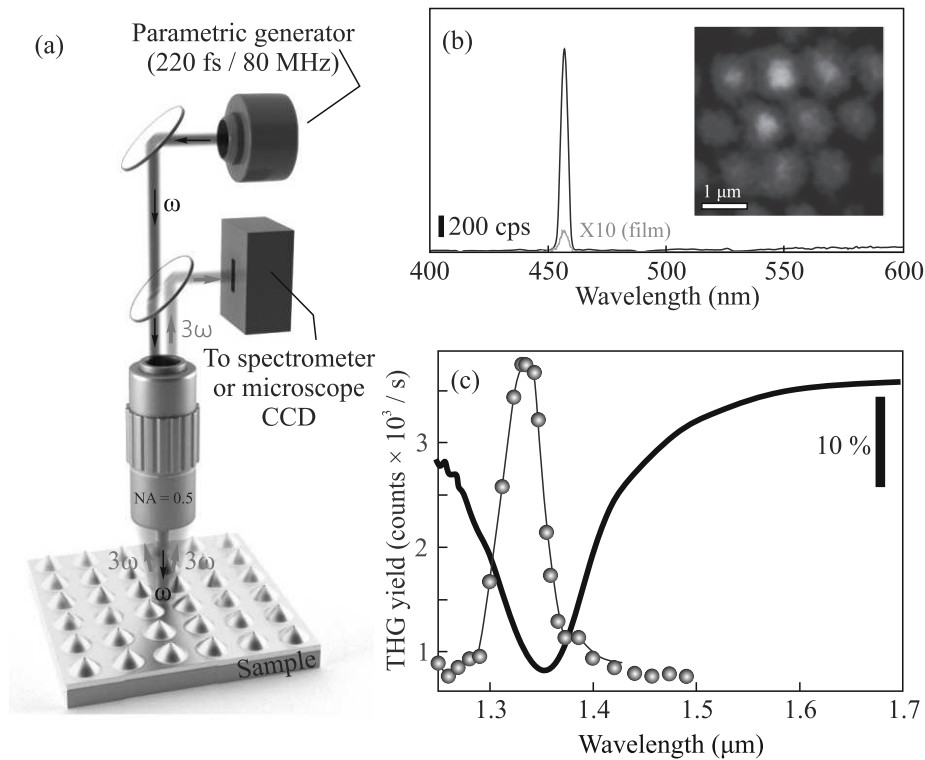


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Схема накачки и регистрации сигнала ГТГ от плазмонных метаповерхностей, состоящих из массивов полых нановыпуклостей на поверхности золотой пленки ($d = 0.9 \mu\text{м}$; $E = 0.95 \text{ нДж}$). (б) – Типичный спектр ГТГ указанных наноструктур в сравнении с аналогичным спектром, измеренным от ровной поверхности золотой пленки. Длина волны и средняя мощность излучения накачки наноструктур на основной гармонике – 1370 нм и 40 мВт , соответственно. На вставке приведено микроскопическое изображение плазмонной метаповерхности в режиме ГТГ. (с) – Зависимость интенсивности сигнала ГТГ от длины волны накачки на основной гармонике (синие маркеры), а также спектр Фурье-ИК отражения соответствующей метаповерхности (серая кривая)

нанса структуры [17]. В данной работе, исследование плазмонного отклика массивов нановыпуклостей, изготовленных методом безабляционной лазерной печати, впервые проводилось методом измерения интенсивности ГТГ, возбуждавшейся параметрическим фс-лазерным генератором (ТОРОЛ, Авеста-проект), обеспечивающим возможность перестройки длины волны накачки в спектральном диапазоне возбуждения коллективного плазмонного резонанса. В данных экспериментах излучение накачки (220 фс , 80 МГц) на длине волны основной гармоники ($\lambda_\omega = 1230\text{--}1500 \text{ нм}$) фокусировалось посредством объектива с числовой апертурой $\text{NA} = 0.5$, обеспечивая возбуждение участка поверхности образца с плазмонными нановыпуклостями диаметром в $15 \mu\text{м}$, при соответствующей настройке размера входного лазерного пучка в объектив при помощи системы из двух линз (рис. 3а). Сигнал третьей гармоники собирался указанным объективом и направлялся посредством спектрально-селективного светоделительного куба на ПЗС-камеру оптического микроскопа или

на конфокально-связанный спектрометр, объединяющий монохроматор и чувствительную охлаждаемую ПЗС-камеру (Shamrock 303i/Newton, Andor). Типичный спектр ГТГ, полученный при возбуждении массива плазмонных нановыпуклостей ($d = 0.9 \mu\text{м}$; $E = 0.95 \text{ нДж}$) на длине волны накачки $\lambda_\omega = \lambda_R = 1370 \text{ нм}$ приведен на рис. 3б, демонстрируя нелинейную эмиссию на длине волны $\lambda_{3\omega} = \lambda_\omega/3 \approx 456.6 \text{ нм}$ и интенсивность сигнала, превышающую таковую от поверхности ровной золотой пленки практически на 2 порядка. Оптическая визуализация плазмонной метаповерхности в режиме генерации третьей гармоники указывает, что поверхность нановыпуклостей являются наиболее интенсивным источником детектируемого сигнала вследствие ожидаемого усиления локальной амплитуды электромагнитного поля на длине волны возбуждения, согласованной с λ_R (вставка, рис. 3с). Следует отметить, что особенности пропускания спектрально-селективных элементов в используемой оптической установке не позволяют регистри-

ровать эффект генерации второй гармоники, также наблюдающийся в плазмонных наноструктурах вследствие нарушения симметрии на границе раздела [18].

Зависимость интенсивности ГТГ от интенсивности накачки следует кубическому степенному закону, подтверждая трехфотонный характер поглощения для данного нелинейного процесса. Вместе с тем, даже незначительная спектральная отстройка длины волны накачки λ_ω от положения коллективного плазмонного резонанса на ± 30 нм приводит к драматическому снижению величины $I_{3\omega}$ практически на порядок (синяя кривая, рис. 3с). Систематические измерения зависимости сигнала генерации третьей гармоники от длины волны накачки λ_ω позволили восстановить спектральную форму резонанса, которая оказалась практически в 2 раза более узкой ($\Delta\lambda_{NL} \approx 50$ нм) в сравнении с наблюдаемой в спектре Фурье-ИК отражения полуширины провала ($\Delta\lambda \approx 110$ нм). Указанное несоответствие может быть связано с использованием отражательного объектива с достаточно высокой числовой апертурой ($NA = 0.5$) для измерения Фурье-ИК спектров отражения массивов нановыпуклостей размером 300×300 мкм². Это приводит к возбуждению наноструктур под углами, отличными от нормального падения, приводя к увеличению полуширины $\Delta\lambda$ детектируемого резонансного пика. Следует отметить, что об уменьшении добротности $Q \sim \lambda_R/\Delta\lambda$ коллективных резонанса типа КССК массива плазмонных наноструктур при увеличении числовой апертуры объектива, использующегося для сбора оптического сигнала, сообщалось в работах [19, 20]. Кроме того, измерения плазмонного отклика методом генерации третьей гармоники носят более локальный характер, минимизирующий возможную вариацию геометрической формы нановыпуклостей от структуры к структуре. Небольшое рассогласование максимумов плазмонного отклика в линейных и нелинейных оптических измерениях может быть связано с небольшим отклонением угла падения излучения накачки основной гармоники относительно нормали к поверхности золотой пленки, а также наличием угловой дисперсии коллективной плазмонной моды. Вместе с тем, измеренная по вариации нелинейного ГТГ отклика добротность коллективного плазмонного резонанса массива плазмонных нановыпуклостей, изготовленных методом прямой фемтосекундной лазерной печати, достигает значения $Q \sim \lambda_R/\Delta\lambda_{NL} \approx 27$, что находится на уровне лучших экспериментальных демонстраций поддерживающих КССК плазмонных метаповерхностей, реализованных с исполь-

зованием дорогостоящих многостадийных литографических методов [19–21].

5. В заключение, представлены результаты по изготовлению с использованием методов прямой фемтосекундной лазерной печати плазмонных метаповерхностей, состоящих из упорядоченных полых золотых нановыпуклостей, а также исследованию их оптических и нелинейных оптических свойств. Продемонстрировано, что изготовленная метаповерхность демонстрирует регистрируемые в спектре Фурье-ИК отражения высокодобротные коллективные плазмонные резонансы, обеспечивающие усиление ГТГ на два порядка в сравнении ровной золотой пленки при спектральном согласовании резонанса структуры с длиной волны накачки основной гармоники. Анализ интенсивности ГТГ как функции длины волны накачки указывает на достижение величины добротности коллективного плазмонного резонанса на уровне передовых метаповерхностей поддерживающих квази-связанные состояния в континууме, указывая на перспективность применения масштабируемых методов фс-лазерной печати для изготовления резонансных наноструктур под различные задачи реализации передовых сенсорных устройств, а также нано- и нелинейной оптики.

Финансирование работы. Работа финансировалась за счет гранта Российского научного фонда (проект 21-79-10197).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. J. A. Schuller, E. S. Barnard, W. Cai, Y. C. Jun, J. S. White, and M. L. Brongersma, *Nat. Mater.* **9**(3), 193 (2010).
2. H. A. Atwater and A. Polman, *Nat. Mater.* **9**, 205 (2010).
3. A. G. Brolo, *Nat. Photon.* **6**(11), 709 (2012).
4. V. G. Kravets, A. V. Kabashin, W. L. Barnes, and A. N. Grigorenko, *Chem. Rev.* **118**, 5912 (2018).
5. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 13 (2016).
6. C. Huang, C. Huang, C. Zhang, S. Xiao, Y. Wang, Y. Fan, Y. Liu, N. Zhang, G. Qu, H. Ji, J. Han, L. Ge, Y. Kivshar, and Q. Song, *Science* **367**, 1018 (2020).
7. A. Tittl, A. Leitis, M. Liu, F. Yesilkoy, D. Y. Choi, D. N. Neshev, Y. S. Kivshar, and H. Altug, *Science* **360**, 1105 (2018).
8. K. Koshelev, S. Kruk, E. Melik-Gaykazyan, J.-H. Choi, A. Bogdanov, H.-G. Park, and Y. Kivshar, *Science* **6475**, 288 (2020).
9. K. L. Koshelev, Z. F. Sadrieva, A. A. Shcherbakov, Y. S. Kivshar, and A. A. Bogdanov, *Phys.-Uspekhi* **93**, 528 (2023).

10. X.W. Wang, A.A. Kuchmizhak, X. Li, S. Juodkazis, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, P.A. Danilov, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, and N.A. Inogamov, *Phys. Rev. Appl.* **8**, 044016 (2017).
11. P.A. Danilov, D.A. Zayarny, A.A. Ionin, S.I. Kudryashov, A.A. Rudenko, A.A. Kuchmizhak, O.B. Vitrik, Yu.N. Kulchin, V.V. Zhakhovsky, and N.A. Inogamov, *JETP Lett.* **104**, 759 (2017).
12. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, and V.A. Khokhlov, *Nanoscale Res. Lett.* **11**, 1 (2016).
13. D. Pavlov, S. Syubaev, A. Kuchmizhak, S. Gurbatov, O. Vitrik, E. Modin, S. Kudryashov, X. Wang, S. Juodkazis, and M. Lapine, *Appl. Surf. Sci.* **469**, 514 (2019).
14. D. Pavlov, S. Gurbatov, S.I. Kudryashov, P.A. Danilov, A.P. Porfirev, S.N. Khonina, O.B. Vitrik, S.A. Kulinich, M. Lapine, and A.A. Kuchmizhak, *Opt. Lett.* **44**, 283 (2019).
15. E. Stankevicius, K. Vilkevičius, M. Gedvilas, E. Bužavaitė-Vertelienė, A. Selskis, and Z. Balevicius, *Adv. Opt. Mater.* **9**, 2100027 (2021).
16. K.A. Sergeeva, D.V. Pavlov, A.A. Seredin, E.V. Mitsai, A.A. Sergeev, E.B. Modin, A.V. Sokolova, T.C. Lau, K.V. Baryshnikova, M.I. Petrov, S.V. Kershaw, A.A. Kuchmizhak, K.S. Wong, AND A.L. Rogach, *Adv. Func. Mater.* **33**, 2307660 (2023).
17. A.A. Sergeev, D.V. Pavlov, A.A. Kuchmizhak, M.V. Lapine, W.K. Yiu, Y. Dong, N. Ke, S. Juodkazis, N. Zhao, S.V. Kershaw, and A.L. Rogach, *Light Sci. Appl.* **9**, 16 (2021).
18. J. Butet, P.F. Brevet, and O.J.F. Martin, *ACS Nano* **9**, 10545 (2015).
19. Y. Liang, H. Lin, S. Lin, J. Wu, W. Li, F. Meng, Y. Yang, X. Huang, B. Jia, and Y. Kivshar, *Nano Lett.* **21**, 8917 (2021).
20. Y. Liang, K. Koshelev, F. Zhang, H. Lin, S. Lin, J. Wu, B. Jia, and Y. Kivshar, *Nano Lett.* **20**, 6351 (2020).
21. W. Jung, Y.-H. Jung, P.V. Pikhitsa, J. Feng, Y. Yang, M. Kim, H.-Y. Tsai, T. Tanaka, J. Shin, K.-Y. Kim, H. Choi, J. Rho, and M. Choi, *Nature* **592**, 7852 (2021).

Динамика “дышащих” скирмионов¹⁾

И. С. Лобанов, В. М. Уздин²⁾

Университет ИТМО, физический факультет, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 марта 2024

После переработки 9 апреля 2024 г.

Принята к публикации 10 апреля 2024 г.

Для описания динамики хиральных топологических систем получено обобщенное уравнение Тилиа, учитывающее заданный набор низкоэнергетических возбуждений равновесной магнитной структуры. Для магнитных скирмионов включена “дыхательная” мода, соответствующая изменению их размера. Исследована релаксация магнитной структуры при изменении магнитного поля. Показана важность сохранения гамильтоновой формы уравнений движения. Радиус и спиральность скирмиона оказываются канонически сопряженными переменными, и только их одновременный учет позволяет воспроизвести основные особенности магнитной релаксации при включении (выключении) поля, сопровождающейся осцилляциями радиуса.

DOI: 10.31857/S1234567824100069, EDN: SKAUJN

1. Введение. Доменные стенки и другие неколлинеарные магнитные структуры рассматриваются в настоящее время, как кандидаты на роль носителей информации в новых технологиях беговой магнитной памяти [1, 2]. Особый интерес представляют топологические магнитные структуры, которые можно характеризовать топологическими индексами – целыми числами, сохраняющимися при непрерывном изменении намагниченности [3]. Эти системы могут быть локализованы в малой области пространства, что позволяет иметь высокую плотность магнитной записи. Неизменность топологических индексов способствует их устойчивости вплоть до комнатных температур, а возможность быстрого движения под действием малых токов [4] приводит к высокой скорости и энергоэффективности таких технологий памяти. Скирмионы и другие топологические структуры, называемые топологическими солитонами, могут быть использованы и в устройствах передачи информации, сенсорных и логических спинтронных устройствах [5, 6].

Вместе с тем, несмотря на относительно малый размер топологических магнитных структур, даже двумерные скирмионы, наблюдаемые при комнатных температурах, обычно содержат сотни тысяч и даже миллионы отдельных магнитных моментов [7, 8]. Это усложняет анализ их устойчивости и моделирование движения, особенно при наличии локализованных магнитных структур, взаимодействующих

друг с другом. Устойчивость топологических солитонов относительно тепловых флуктуаций и случайных возмущений может быть количественно оценена на основе теории переходного состояния [9, 10]. Стохастическое моделирование динамики здесь не представляется возможным вследствие фундаментальной проблемы “редких событий”: период осцилляций отдельных моментов, как правило, оказывается на 10–15 порядков меньше характерного времени жизни магнитной системы [11].

В общем случае динамика магнитных структур в рамках моделей гейзенберговского типа задается уравнениями Ландау–Лифшица–Гильберта (ЛЛГ) для каждого магнитного момента [12]. Большое число степеней свободы требует решения системы связанных уравнений, что не позволяет проводить моделирование динамики на достаточно больших временах, представляющих интерес для приложений. Вследствие того, что магнитные скирмионы и другие локализованные магнитные топологические структуры при непрерывных преобразованиях намагниченности сохраняют топологические индексы, их пространственная форма кардинально не меняется и в простейшем приближении их часто рассматривают, как жесткие квазичастицы, не меняющие своего магнитного профиля. В этом предположении, из уравнений ЛЛГ, можно получить выражение для скорости магнитной структуры, перемещающейся в пространстве, как единое целое. Такой подход был использован А. Тилем для расчета скорости движения доменных стенок [13]. В дальнейшем он использовался и при описании динамики скирмионов и других тополо-

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: v_uzdin@mail.ru

гических структур [14, 15]. Для квазидвумерных систем положение жесткого скирмиона задается координатами x и y его центра [16]. Движение топологических солитонов может быть вызвано спин-поляризованным током [17], неоднородным магнитным полем [18] или градиентом анизотропии [19]. Соответствующие члены, входящие в правую часть уравнений ЛЛГ или Тиля, подобны силам в уравнениях движения материальной точки [20, 21].

Хотя приближение жесткой формы позволяет легко описывать динамику топологических солитонов, иногда это приближение оказывается недостаточным, особенно когда необходимо точно определить траекторию движения в пространственно-неоднородных средах через достаточно большой промежуток времени. Поэтому были разработаны теории, позволяющие выйти за пределы этого приближения, учитывая тепловые эффекты [22] и усреднение по высокочастотным возбужденным состояниям локализованной магнитной структуры [23]. В то же время в скирмионных структурах наряду с модами, соответствующими их движению в целом, существуют другие квазинулевые моды и низкочастотные возбуждения [24], которые могут существенно влиять на магнитный профиль и движение, особенно при наличии неоднородностей. В настоящей работе получено обобщенное уравнение Тиля, которые учитывают соответствующие степени свободы. Общий теоретический подход используется для описания релаксации скирмионных состояний при изменении внешнего магнитного поля. Сравнение с результатами моделирования динамики для совокупности всех магнитных моментов, составляющих систему, показывает важность сохранения гамильтоновой формы уравнений движения при выделении набора возбуждений, включенных в обобщенное уравнение Тиля.

2. Микромагнитная модель и анзац для скирмиона. Будем рассматривать тонкую магнитную пленку с взаимодействием Дзялошинского–Мории (ДМ), в которой могут существовать различные хиральные топологические солитоны [25], в частности, магнитные скирмионы. Описание таких структур возможно на основе обобщенной модели Гейзенберга, включающей наряду с симметричным обменным взаимодействием магнитную анизотропию, антисимметричный обмен ДМ и взаимодействие со внешним магнитным полем [9, 26]. Магнитное дипольное взаимодействие для тонкой пленки может учитываться посредством перенормировки параметра анизотропии [27]. В рамках непре-

рывной микромагнитной модели энергию системы запишем в виде [28, 29]

$$E = d \int_{\Omega} (w_{ex} + w_{DM} + w_a + w_z) dS. \quad (1)$$

Здесь интегрирование идет по поверхности пленки Ω , через d обозначена ее толщина. Магнитные конфигурации, однородные по толщине пленки, будем задавать единичным вектором, направленным вдоль намагниченности в каждой точке поверхности $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. В сферической системе координат

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

Плотности различных вкладов в энергию задаются следующим образом: гейзенберговский обмен в (1) определяется параметром обменной жесткости A :

$$w_{ex} = A(\nabla \mathbf{n})^2,$$

плотность энергии взаимодействия ДМ – величиной и направлением вектора ДМ. Будем для этого вклада использовать выражение,

$$w_{DM} = D(n_z \nabla \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \nabla)n_z),$$

которое стабилизирует доменные стенки неелевского типа.

Плотность энергии одноосной анизотропии задается константой анизотропии $K > 0$. Ось анизотропии $\mathbf{z}$, предполагается перпендикулярной плоскости пленки:

$$w_a = K(1 - n_z^2).$$

Наконец, плотность зеемановской энергии взаимодействия с внешним полем H , направленным вдоль оси z , пропорциональна намагниченности насыщения M_s :

$$w_z = \mu_0 H M_s (1 - n_z).$$

Величины A , D , K , M_s будем предполагать одинаковыми по всей магнитной пленке. В качестве естественной меры длины удобно использовать период спиновой спирали $L_D = 4\pi A/D$.

Магнитным скирмионам соответствуют локальные минимумы функционала (1). Точного аналитического решения для поля $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, соответствующего скирмиону, при произвольных значениях магнитных параметров не существует. Однако, приближенно, магнитный профиль достаточно хорошо воспроизводится выражениями, содержащими всего несколько параметров, имеющих простой физический смысл. Такие анзацы, на основе аналитических выражений для профиля доменных стенок [30], хорошо воспроизводит экспериментально наблюдаемые магнитные конфигурации скирмионов в системе Fe/Ir(111) [31].

Учитывая аксиальную симметрию скирмиона, зададим $\mathbf{r}$ в полярных координатах относительно центра скирмиона (X, Y)

$$\mathbf{r} = (X + r \cos \phi, Y + r \sin \phi).$$

В этом случае зенитный угол θ зависит только от r , а азимутальный ψ связан с χ соотношением $\psi = \phi - \chi$, где постоянная χ , называемая спиральностью (*helicity*) структуры, представляет собой угол между намагниченностью в плоскости пленки и радиальным направлением от центра скирмиона. Равновесная спиральность определяется направлением вектора ДМ и в рассматриваемом случае неелевского скирмиона равна 0.

Для зависимости $\theta(r)$ используются выражения (анзацы), включающие в качестве подгоночных параметров радиус скирмиона и ширину доменной стенки на его границе. Конкретный аналитический вид в разных работах отличается, хотя равновесный профиль выглядит достаточно близко. Так в [31, 29, 32] используется зависимость

$$\theta = 2 \arctan \exp \frac{r - \rho}{w} + 2 \arctan \exp \frac{r + \rho}{w} - \pi, \quad (2)$$

тогда как в [28]:

$$\theta = 2 \arctan \frac{\sinh(\rho/w)}{\sinh(r/w)}, \quad (3)$$

где ρ – радиус скирмиона, а w – ширина его доменной стенки.

Рассчитанная в рамках микромагнитной модели (1) магнитная конфигурация неелевского скирмиона при параметрах, используемых ниже, представлена в дополнительных материалах. Там же приведена магнитная текстура блоховского скирмиона, которая получается при другом виде взаимодействия ДМ, и показаны величины, входящие в анзацы (2) и (3).

Энергия модельного скирмиона может быть найдена подстановкой анзаца (2) или (3) в функционал (1). Так подстановка (3) дает следующее выражение для энергии [28]:

$$E = 2\pi d (AI_1 + D \cos \chi I_2 + KI_3 + HI_4), \quad (4)$$

в терминах интегралов

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty \left(\left(\frac{\partial \theta}{\partial \rho} \right)^2 + \frac{\sin^2 \theta}{\rho^2} \right) \rho d\rho, \\ I_2 &= \int_0^\infty \left(\frac{\partial \theta}{\partial \rho} + \frac{\sin(2\theta)}{2\rho} \right) \rho d\rho, \\ I_3 &= \int_0^\infty \sin^2 \theta \rho d\rho, \quad I_4 = \int_0^\infty (1 - \cos \theta) \rho d\rho. \end{aligned}$$

Для интегралов может быть получена приближенная оценка [28]:

$$\begin{aligned} I_1 &\sim 2 \left(\frac{\rho}{w} + \frac{w}{\rho} \right), \quad I_2 \sim -\pi\rho, \\ I_3 &\sim 2w\rho, \quad I_4 \sim 2 \left(\frac{\rho^2}{2} + \frac{\pi^2 w^2}{24} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Использование вместо приближения (3) выражения (2) дает близкое значения для энергии скирмиона, так как основной вклад в обменную энергию происходит от области вблизи доменной границы, в окрестности которой обе аппроксимации имеют одинаковые асимптотики. Например, полученные в работе [32] вклады в энергию для анзаца (2) совпадают с формулами (5), за исключением множителя перед w^2 в интеграле I_4 , который равен ≈ 0.76 для анзаца (3) и ≈ 0.82 для (2).

Энергия произвольной магнитной текстуры может быть найдена численно. Мы использовали вариант квадратурных формул, дающих ошибку $o(h^3)$ для элемента размера h (см. дополнительные материалы). Намагниченность задается в узлах квадратной решетки, которая разбивается на элементы, содержащие 3×3 узлов. Внутри каждого элемента намагниченность определяется биквадратичной интерполяцией по этим узлам. На границе элементов выполняются условия непрерывности. Входящие в формулы для энергии производные находятся из биквадратичной интерполяции. Интегралы приближенно вычисляются с помощью трехточечных квадратурных формул Гаусса–Лобатто.

3. Обобщенное уравнение Тилиа для топологических солитонов. Динамика намагниченности топологических солитонов может быть описана уравнением ЛЛГ

$$\partial_t \mathbf{n} = -\gamma \mathbf{n} \times \mathbf{H}^{\text{eff}} + \alpha \mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n} + \mathbf{T}, \quad (6)$$

где γ – гиромагнитное отношение, α – параметр затухания, а слагаемое $\mathbf{T}$ описывает связь намагниченности со спин-поляризованным электрическим током [17]. Эффективное магнитное поле $\mathbf{H}^{\text{eff}}$ зависит от распределения намагниченности

$$\mathbf{H}^{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta E}{\delta \mathbf{n}}.$$

Отметим, что если записать уравнение ЛЛГ в полярных координатах, то оно будет иметь гамильтонов вид, если обобщенной координате сопоставить угол ψ_i , а канонически сопряженному импульсу $\cos \theta_i$ – [12, 33].

Для численного интегрирования уравнений ЛЛГ будем использовать полуявную схему [34], которая сохраняет нормировку векторов намагниченности.

Численное решение уравнений ЛЛГ для топологических солитонов в общем виде встречает вычислительные сложности в связи с большим числом степеней свободы, связанных с внутренними степенями свободы локализованной магнитной структуры. Однако, не все эти степени свободы оказываются одинаково важными при описании отклика на внешние воздействия. Если у внешнего возмущения отсутствуют резонансные свойства, то наиболее существенными должно быть низкоэнергетические возбуждения и степени свободы, от которых энергия системы не зависит, называемые нулевыми модами. К ним относятся, прежде всего, трансляционные степени свободы. Учет только таких мод для доменных стенок привел к уравнениям Тилиа [13], которое может быть использовано, как простейшее приближение и для описания динамики скирмионов [16].

В более общей постановке задачи форма топологического солитона не обязательно сохраняется, и ее изменение можно учесть введением дополнительных параметров в анзац для магнитного профиля, например, как в (2) или (3). В этом случае можно получить уравнения, которые описывают динамику этих параметров, представляющие собой обобщенные уравнения Тилиа [23, 35].

Полагая, что намагниченность описывается анзацем

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}; t) = \mathbf{n}(\mathbf{a}(t), \mathbf{r}) \quad (7)$$

с некоторым набором параметров $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_M)$, и сужая уравнение (6) на степени свободы $\mathbf{a}$, получаем обобщенные уравнения Тилиа в общем виде [23]:

$$D_{ij}\dot{\mathbf{a}}_j - G_{ij}\dot{\mathbf{a}}_j = F_i, \quad (8)$$

где G – антисимметричная гиротропная матрица,

$$G_{ij} = \frac{M_s}{\gamma} \int_{\Omega} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial a_i} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial a_j} d\mathbf{r},$$

D – симметричная матрица коэффициентов диссипации:

$$D_{ij} = \frac{\alpha M_s}{\gamma} \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial a_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial a_j} d\mathbf{r},$$

а обобщенная сила F_i имеет вид

$$F_i = - \int_{\Omega} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{n}} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial a_i} d\mathbf{r} = - \frac{\partial E}{\partial a_i}.$$

Будем считать, что общее уравнение (7) сводится к (3), а параметрами a_i , от которых зависит магнитная конфигурация, являются радиус скирмиона ρ , его спиральность χ и ширина доменной стенки ω . Изменение радиуса является одним из самых низкоэнергетических возбуждений системы, ниже которого по энергии лежат только нулевые трансляционные

моды. Эта степень свободы представляет наибольший интерес при рассмотрении динамического поведения на временах, представляющих практический интерес. Толщину доменной стенки в дальнейшем мы фиксируем так как ей соответствует большая энергия возбуждения и характерное время ее релаксации гораздо меньше, чем у радиуса. Спиральность оставим в качестве параметра, поскольку эта степень свободы оказывается сильно связана с радиусом.

Выбирая в качестве коллективных координат радиус ρ и спиральность χ , получаем уравнения динамики, подставляя анзац (3) в обобщенное уравнение Тилиа (8).

Так как магнитная пленка предполагается изотропной и внешнее магнитное поле однородным, динамические уравнения на ρ и χ не зависят от положения центра скирмиона:

$$\begin{cases} \alpha \frac{2\pi I_3}{w^2} \dot{\rho} + \frac{2\pi I_3}{w} \dot{\chi} = \frac{\partial E}{\partial \rho}, \\ -\frac{2\pi I_3}{w} \dot{\rho} + \alpha 2\pi I_3 \dot{\chi} = \frac{\partial E}{\partial \chi}. \end{cases} \quad (9)$$

Движение центра скирмиона при учете тока спинового переноса j [36] описывается классическим уравнением Тилиа:

$$\begin{cases} \alpha \pi I_1 \dot{X} + 4\pi \dot{Y} = \frac{\partial E}{\partial X} - j_x \pi I_1, \\ -4\pi \dot{X} + \alpha \pi I_1 \dot{Y} = \frac{\partial E}{\partial Y} - j_y \pi I_1. \end{cases} \quad (10)$$

Коэффициенты в этих уравнениях представляют собой интегралы, определяемые магнитной текстурой скирмиона, которая может меняться со временем и зависит, в частности, от радиуса скирмиона, спиральности и толщины доменной стенки. Эти коэффициенты ранее возникали в выражении для энергии (1). Приведенные выше приближенные значения соответствующих интегралов (5) [28] имеют достаточную точность для воспроизведения динамики скирмионов, за исключением обменного интеграла I_1 , для которого требуется более точное приближение:

$$I_1 \approx 2 \left(\xi + \frac{1}{\xi} + \frac{\pi^2}{12\xi^3} + \frac{7\pi^4}{240\xi^5} + \frac{31\pi^6}{1344\xi^7} \right),$$

где $\xi = \rho/w$.

Для того, чтобы получить динамические уравнения для изменения размера скирмиона при фиксированных остальных параметрах, входящих в (3), достаточно в уравнениях (9) положить $\dot{\chi} = 0$. При этом дыхательная мода останется единственной учитываемой в (3), и естественно ожидать монотонного изменения радиуса в процессе релаксации при изменении внешних условий.

Отметим что, в отсутствие диссипации одновременный учет степеней свободы, соответствующих из-

менению радиуса и спиральности сохраняет гамильтонову структуру уравнений динамики, причем спиральность и радиус оказываются канонически сопряженными переменными. Аналогично, сопряженными переменными можно считать и степени свободы, связанные с движением вдоль осей x и y .

Степень свободы, связанная с изменением размера структуры, как коллективная переменная может быть определена по-разному. Такая мода возникает, как собственный вектор, соответствующий одному из наименьших собственных чисел, равновесного гессиана энергии [9], и как низкоэнергетическое возбуждение при анализе линеаризованного уравнения ЛЛГ [24], и на основе приведенных выше анзацев (2) и (3). Хотя изменение формы и профиля скирмиона при возбуждении этих мод похоже, они не совпадают тождественно и могут быть связаны с другими степенями свободы магнитной системы по-разному.

4. Релаксация скирмиона при изменении магнитного поля. Рассмотрим процесс релаксации размера и магнитного профиля скирмиона при включении и выключении внешнего магнитного поля на основе полного уравнения ЛЛГ и сокращенного описания, включающего радиус скирмиона в качестве одной из переменных в обобщенном уравнении Тилиа. Однородное магнитное поле не нарушает аксиальной симметрии системы, но сильно влияет на равновесный радиус локализованной магнитной структуры. Поэтому естественно ожидать, что учет этой степени свободы позволит воспроизвести основные особенности динамического поведения топологического солитона. Изменение радиуса скирмиона проявляется также при движении в гранулированной среде с изменяющейся перпендикулярной магнитной анизотропией [37], при сужении или уширении магнитной дорожки, на которой находится скирмион до величины, сравнимой с его собственным размером [38], в процессе коллапса скирмиона при движении вдоль пути с минимальным перепадом энергии [9, 39]. Поэтому учет таких возбуждений важен для аккуратного описания отклика на различные внешние воздействия.

На рисунке 1с, показана зависимость радиуса скирмиона от времени в процессе установления равновесия. Мы рассмотрели случай анизотропии $K/(M_s B_0) = 1.28$, что соответствует $\rho/w \approx 5.54$ для равновесного скирмиона в отсутствие внешнего поля. Сплошная (красная) кривая соответствует учету всех степеней свободы в уравнении ЛЛГ, а штрихпунктирная (синяя) учету только радиальной переменной в обобщенном уравнении Тилиа. В последнем случае имеет место быстрое монотонное

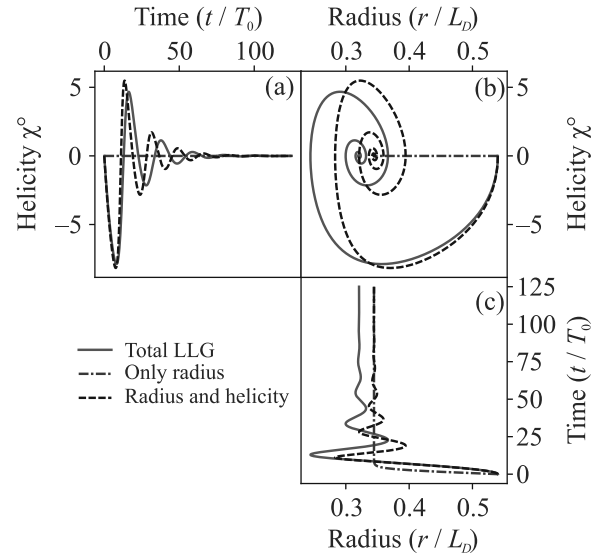


Рис. 1. (Цветной онлайн) Динамика скирмиона при включении внешнего магнитного поля $B = 0.032B_0$. Начальное состояние соответствует равновесному скирмиону в отсутствие магнитного поля. Красная сплошная, черная пунктирная и синяя штрихпунктирная линии – решения, полученные с помощью полной системы уравнений ЛЛГ, обобщенного уравнения Тилиа с учетом возможности изменения угла хиральности и радиуса и только радиуса, соответственно

уменьшение радиуса от равновесного значения в отсутствие поля до значения в поле $B = 0.032 B_0$ при неизменных значениях остальных параметров анзаца (3), где $B_0 = D^2/(2M_s A)$ – характерное магнитное поле. Ларморовская частота $T_0^{-1} = \gamma B_0$ для этого поля задает естественную единицу времени. Совместное решение уравнений ЛЛГ для всех магнитных моментов демонстрирует гораздо более медленную релаксацию радиуса, сопровождающуюся осцилляциями около нового положения равновесия. Само значение равновесного радиуса также немного отличается в этих двух случаях. Причина различия заключается в том, что при увеличении магнитного поля меняется и ширина доменной стенки скирмиона, хотя ее относительное изменение и значительно меньше, чем у радиуса. При учете изменения ширины доменной стенки на основе анзаца (3) система обобщенных уравнений Тилиа будет включать три уравнения (см. дополнительные материалы). Процесс релаксации оказывается ближе к решению полной системы уравнений ЛЛГ для всех степеней свободы, но качественно не отличается от представленного на рис. 1. Осцилляции радиуса при решении полной системы уравнений ЛЛГ говорят о том, что энергия,

связанная с возбуждением дыхательной моды перекачивается в другие моды, а затем возвращается обратно, постепенно рассеиваясь. Величина диссипации α в уравнении ЛЛГ (6) принята равной 0.05. Это значение характерно для ферромагнитных металлов и разбавленных магнитных полупроводников [17]. Колебания затухают быстрее, если увеличить параметр затухания. Используемый анзац (3) позволяет указать основную моду, которая оказывается связанной с дыхательной в процессе релаксации. Ей соответствует степень свободы, определяющая спиральность скирмиона. Релаксация радиуса при учете и этой степени свободы в обобщенном уравнении Тилиа показана на рис. 1 пунктирной (черной) линией.

На рисунке 1а представлены зависимости параметра хиральности от времени, полученные из уравнений ЛЛГ и обобщенного Тилиа в тех же приближениях. На рисунке 1б показана зависимость радиуса от параметра спиральности, представляющая собой спираль, напоминающую фазовую траекторию осциллятора с затуханием. Это, по-видимому, не случайное сходство. Обобщенное уравнение Тилиа при учете степеней свободы, связанных с изменением радиуса и спиральности можно представить, как и полное уравнение ЛЛГ, в гамильтоновом виде. Если радиус рассматривать, как обобщенную координату, то угол, определяющий спиральность, представляет собой канонически сопряженный обобщенный импульс. Именно эти степени свободы оказываются связанными, и их совместное использование в качестве переменных в обобщенном уравнении Тилиа приводит к динамическому поведению, близкому к результату решения полного уравнения ЛЛГ. Хотя спиральность меняется всего примерно на 4 градуса, энергия, связанная с этим возбуждением, того же порядка, что при изменении радиуса скирмиона на 25 %. Отметим, что трансляционные моды, соответствующие движению вдоль перпендикулярных направлений в определенном приближении также являются канонически сопряженными. На рисунке 2 показана релаксация радиуса и хирального угла скирмиона при выключении магнитного поля. Здесь, даже с тем же параметром диссипации $\alpha = 0.05$, релаксация при решении полного уравнения ЛЛГ идет без нескольких осцилляций: радиус и угол проскакивают точку равновесия, но затем монотонно приближаются к равновесному значению. Такое же поведение получается и из обобщенного уравнения Тилиа: включающего эти две степени свободы. Соответствующие кривые показаны, как и на рис. 1, красной сплошной и синей штрих-пунктирной линиями. Если оставить только

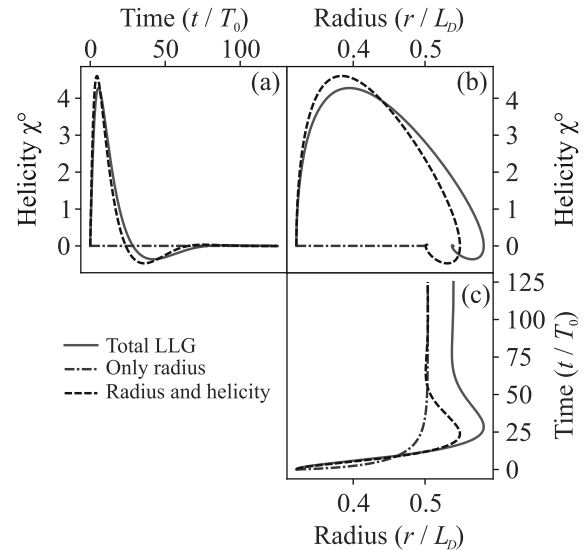


Рис. 2. (Цветной онлайн) Релаксация скирмиона, находящегося в равновесном состоянии во внешнем магнитном поле $B = 0.032B_0$, при отключении поля. Красная сплошная, черная пунктирная и синяя штрих-пунктирная линии – решения, полученные с помощью полной системы уравнений ЛЛГ, обобщенного уравнения Тилиа с учетом возможности изменения угла хиральности и радиуса и только радиуса, соответственно

дыхательную моду, получается монотонная релаксация к равновесному значению радиуса, показанная на рис. 2 черным пунктиром. Отличие равновесного радиуса при решении уравнения ЛЛГ и обобщенного уравнения Тилиа связано, как и на рис. 1, с зависимостью ширины доменной стенки от поля, которая фиксирована в нашем приближении (см. дополнительные материалы). Полученная выше разница релаксации по радиусу и углу и только по радиусу будет особенно существенна, если рассматривается периодическое изменение поля с частотой, сравнимой с обратным временем релаксации. В этом случае эффект можно было бы достаточно просто наблюдать экспериментально.

Рассмотренное выше возмущение системы однородным полем существенно влияет на размер скирмиона, который определяется его радиусом. Относительное изменение ширины доменной стенки существенно меньше. В присутствии точечных дефектов и наноструктурных неоднородностей при движении скирмионов могут возбуждаться и другие низкоэнергетические моды, связанные с локализацией скирмиона вблизи дефектов или деформацией его аксиально симметричной формы [40, 41]. В этом случае для использования обобщенного уравнения Тилиа необходим другой анзац для описания магнитного профиля скирмиона. При использовании новой обобщенной

координаты полезно проверить возможность введения канонически сопряженного ей импульса, как на вероятную степень свободы, которую нужно учитывать для адекватного описания динамики.

5. Заключение. Для локализованных магнитных структур с большим числом степеней свободы возможно сокращенное описание с гораздо меньшим числом переменных, которое воспроизводит релаксацию и динамику магнитной системы под воздействием внешних полей и токов. Для топологических хиральных структур используется естественный анзац, параметры которого можно связать с внутренними степенями свободы, наиболее легко возбуждаемыми при изменении параметров системы или внешних воздействиях. Они могут включать как степени свободы, от которых энергия не зависит (нулевые моды), так и низкоэнергетические возбуждения, представляющие собой собственные значения гессиана энергии равновесной магнитной конфигурации. Если учитывать только трансляционные нулевые моды, из уравнения ЛЛГ получается уравнение Тилиа, широко используемое, например, для моделирования динамики скирмионов. Изменение радиуса скирмиона позволяет рассматривать дыхательную моду, которой соответствует одно из наименьших положительных собственных значений гессиана. При этом оказывается, что описание динамики и релаксации качественно улучшается при включении дополнительных степеней свободы, которые позволяют сохранить гамильтонову форму уравнений, имеющуюся у уравнений ЛЛГ. Так включение канонически сопряженной к дыхательной моде спиральности позволяет описать колебательный процесс установления равновесного радиуса, особенно важный в условиях малого затухания. Оказывается, что в процессе релаксации энергия переходит из дыхательной моды к канонически сопряженной, спиральной, обладающей большим собственным значением, и обратно. При этом начальному и конечному состояниям, соответствующим разным магнитным полям, отвечает одно и то же значение параметра спиральности. Условие гамильтоновой формы обобщенного уравнения Тилиа позволяет, таким образом, определить переменные, существенные для адекватного сокращенного описания релаксации и динамики.

Финансирование работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 23-72-10028, <https://rscf.ru/en/project/23-72-10028/>).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. S.S.P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, *Science* **320**, 190 (2008).
2. S.S.P. Parkin and S.-H. Yang, *Nat. Nanotechnol.* **10**, 195 (2015).
3. R. Wiesendanger, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16044 (2016).
4. J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, *Nat. Commun.* **4**, 1463 (2013).
5. G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri, and M. Kläui, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, 423001 (2016).
6. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, *Nat. Rev. Mater.* **2**, 17031 (2017).
7. M.N. Potkina, I.S. Lobanov, H. Jónsson, and V.M. Uzdin, *J. Magn. Magn. Mat.*, **549**, 168974 (2022).
8. M.N. Potkina, I.S. Lobanov, H. Jónsson, and V.M. Uzdin, *Phys. Rev. B* **107**, 184414 (2023).
9. И. С. Лобанов, М. Н. Поткина, В. М. Уздин, *Письма ЖЭТФ* **113**, 833 (2021).
10. I.S. Lobanov and V.M. Uzdin, *Phys. Rev. B* **107**, 104405 (2023).
11. I.S. Lobanov and V.M. Uzdin, *Comput. Phys. Commun.* **269**, 108136 (2021).
12. Г. В. Скроцкий, *УФН* **144**, 681 (1984).
13. A. A. Thiele, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 230 (1973).
14. V.M. Kuchkin, K. Chichay, B. Barton-Singer, F.N. Rybakov, S. Blügel, B.J. Schroers, and N.S. Kiselev, *Phys. Rev. B* **104**, 165116 (2021).
15. P.S. Shaban, I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, and I.V. Iorsh, *Phys. Rev. B* **108**, 174440 (2023).
16. N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 899 (2013).
17. J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, *Nat. nanotech.* **8**, 742 (2013).
18. S.L. Zhang, W.W. Wang, D.M. Burn, H. Peng, H. Berger, A. Bauer, C. Pfeleiderer, G. van der Laan, and T. Hesjedal, *Nat. Commun.* **9**, 2115 (2018).
19. X. Wang, W.L. Gan, J.C. Martinez, F.N. Tan, M.B.A. Jalil, and W.S. Lew, *Nanoscale* **10**, 733 (2018).
20. A. Brataas, A.D. Kent, and H. Ohno, *Nat. Mater.* **11**, 372 (2012).
21. I.A. Ado, O.A. Tretiakov, and M. Titov, *Phys. Rev. B* **95**, 094401 (2017).
22. M. Weisshofer, L. Rózsa, and U. Nowak, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 047203 (2021).
23. D.J. Clarke, O.A. Tretiakov, G.-W. Chern, Y.B. Bazaliy, and O. Tchernyshyov, *Phys. Rev. B* **78**, 134412 (2008).
24. S.Z. Lin, C.D. Batista, and A. Saxena, *Phys. Rev. B* **89**, 024415 (2014).
25. V.M. Uzdin, D. Thonig, B. Göbel, and P.F. Bessarab, *Front. Phys.* **11**, 1275990 (2023).
26. J. Hagemester, N. Romming, K. von Bergmann, E.V. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, *Nat. Commun.* **6**, 8455 (2015).

27. I. S. Lobanov, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, *Phys. Rev. B* **94**, 174418 (2016).
28. X. S. Wang, H. Y. Yuan, and X. R. Wang. *Commun. Phys.* **1**, 31 (2018).
29. F. Büttner, I. Lemes, and G. S. D. Beach, *Sci. Rep.* **8**, 4464 (2018).
30. H.-B. Braun. *Phys. Rev. B* **50**, 16485 (1994).
31. N. Romming, A. Kubetzka, C. Hanneken, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 177203 (2015).
32. E. Lu, A. R. Stuart, A. R. Chalifour, J. C. Davidson, P. S. Keatley, K. S. Buchanan, and K. L. Livesey, *J. Magn. Magn. Mat.* **584**, 171044 (2023).
33. Л. А. Тахтаджян, Л. Д. Фаддеев, *Гамильтонов подход в теории солитонов*, Наука, М. (1986), 528 с.
34. J. H. Mentink, M. V. Tretyakov, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, and Th. Rasing, *J. Phys.: Condens. Matter.* **22**(17), 176001 (2010).
35. J. Masell and K. Everschor-Sitte, *Current-Induced Dynamics of Chiral Magnetic Structures: Creation, Motion, and Applications*, in E. Kamenetskii (editors), *Chirality, Magnetism and Magnetoelectricity. Topics in Applied Physics*, Springer, Cham (2021), v. 138.
36. C. Abert, *Eur. Phys. J. B* **92**, 120 (2019).
37. J. V. Kim and M. W. Yoo, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 132404 (2017).
38. X. Chen, W. Kang, D. Zhu, X. Zhang, N. Lei, Y. Zhang, Y. Zhou, and W. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* **111**, 202406 (2017).
39. V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, P. F. Bessarab, and H. Jónsson, *J. Magn. Magn. Mat.* **459**, 236 (2018).
40. C. Reichhardt, C. J. O. Reichhardt, and M. V. Milošević, *Rev. Mod. Phys.* **94**, 035005 (2022).
41. J. Müller and A. Rosch, *Phys. Rev. B* **91**, 054410 (2015).

Плазменный отклик металлической “решетчатой” метаповерхности на подложке¹⁾

М. С. Соколова^{†*}, К. Р. Джикирба⁺, А. С. Астраханцева^{†*}, И. В. Кукушкин⁺, В. М. Муравьев⁺

⁺Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

^{*}Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 28 января 2024 г.

После переработки 11 апреля 2024 г.

Принята к публикации 12 апреля 2024 г.

Экспериментально исследовано пропускание электромагнитного излучения через кремниевую подложку с напыленной с одной стороны квадратной металлической сеткой. Установлено, что электродинамический отклик структуры эквивалентен возбуждению в ней поперечной электромагнитной плазменной моды с плазменной частотой, определяемой геометрическими параметрами решетки, толщиной подложки и ее диэлектрической проницаемостью. Разработана теоретическая модель для качественного описания полученных экспериментальных результатов.

DOI: 10.31857/S1234567824100070, EDN: QJOVOM

Плазменные возбуждения в двумерных системах изучаются более пятидесяти лет [1–15]. Эти исследования привели к открытию множества новых фундаментальных физических эффектов. В частности, была экспериментально обнаружена поперечная электромагнитная плазменная мода для гибридной системы, состоящей из двумерной электронной системы (ДЭЯ) на диэлектрической подложке [16–20]. Как и в случае трехмерных систем для двумерных существуют два принципиально различных типа плазменных волн, продольные электростатические и поперечные электромагнитные волны [17]. Для продольных плазмонов вектор напряженности электрического поля направлен вдоль вектора распространения волны. Напротив, для поперечных электромагнитных плазменных волн переменное электрическое поле, направлено перпендикулярно направлению распространения волны.

Недавно поперечная электромагнитная мода была подробно исследована теоретически [17, 18] и обнаружена экспериментально [19, 20]. Электродинамический отклик системы в типичном для эксперимента случае: плоская однородная волна с линейной поляризацией падает перпендикулярно поверхности бесконечной ДЭС на подложке, задается следующей формулой [16]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon \left(1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{n_s e^2}{m^* \varepsilon_0 \varepsilon d}}. \quad (1)$$

Здесь n_s , e и m^* – концентрация, заряд и эффективная масса носителей заряда в ДЭС, d и ε – толщина и диэлектрическая проницаемость подложки. Следует заметить, что эта формула верна только если длина волны излучения много больше толщины подложки, что эквивалентно $\omega \ll \pi c / (\sqrt{\varepsilon} d)$. В спектре пропускания электромагнитного излучения для данной системы при $\varepsilon(\omega) = 1$ наблюдается резонанс, отвечающий поперечному электромагнитному плазмону, на частоте [18–20]:

$$\omega_{2D} = \sqrt{\frac{n_s e^2}{m^* \varepsilon_0 (\varepsilon - 1) d}}. \quad (2)$$

Одним из условий наблюдения двумерных плазмонов с частотой ω_p является неравенство $\omega_p \tau \gg 1$, где τ – время электронной релаксации. Для современных полупроводниковых и слоистых материалов данное условие ограничивает наблюдение двумерных плазмонов в частотном диапазоне до 500 ГГц областью криогенных температур. Это обстоятельство значительно затрудняет практическое использование двумерной плазмоники.

Было показано, что при комнатной температуре трехмерная решетка из металлических проволок проявляет в сверхвысокочастотном диапазоне электродинамические свойства, эквивалентные трехмерной плазме [21–26]. Аналогично и для двумерной ме-

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru.

²⁾e-mail: muravev@issp.ac.ru

таллической сетки с периодом a и шириной полосок w можно ввести эффективную двумерную концентрацию электронов, которая составляет $n_{\text{eff}} = n_s w / a$. Где n_s – двумерная концентрация электронов в металлической пленке, которые находятся в скин-слое и участвуют в движении. Взаимодействие с внешним электромагнитным полем проявляется в самоиндукции “решетчатой” структуры, что дает эффективную массу электронов [23]:

$$m_{\text{eff}} = \frac{\mu_0 w e^2 n_s}{2\pi} \ln \frac{a}{w}. \quad (3)$$

Рассматривая двумерную решетку на диэлектрической подложке как эффективную электронную систему, мы можем воспользоваться формулой (2) для расчета частоты поперечного плазменного резонанса:

$$\omega_p^2 = \frac{2\pi c^2}{ad(\varepsilon - 1) \ln(a/w)}, \quad \omega_p \ll \frac{\pi c}{\sqrt{\varepsilon} d}. \quad (4)$$

Важно отметить, что полученная плазменная частота метаповерхности зависит от геометрических параметров структуры и не зависит от концентрации электронов в металле.

В настоящей работе мы демонстрируем, что двумерная металлическая решетка на кремниевой подложке выступает в качестве метаповерхности, пропускание и отражение которой имеет отклик, аналогичный отклику эффективной ДЭС, связанному с возбуждением в ней поперечной электромагнитной плазменной моды.

Исследуемые образцы представляли собой плоскопараллельные пластины из высокорезистивного ($> 30 \text{ кОм} \times \text{см}$) кремния, на одной из сторон которых была литографически изготовлена металлическая сетка. Были проведены две серии экспериментов с квадратными образцами $1 \times 1 \text{ см}^2$ толщиной $d = 103$ и 213 мкм . С помощью оптической фотолитографии на их поверхности была изготовлена решетчатая металлическая структура с квадратной элементарной ячейкой с периодом $a = 100, 150, 200$ и 300 мкм и шириной полосок $w = 5, 10, 20$ и 30 мкм (рис. 1). Отношение w/a для всех образцов не превышало 0.1 . Металлический слой, содержащий Cr (25 нм) и Au (700 нм), термически напылялся в вакуумной камере на поверхность кремниевой подложки. Подробная информация о параметрах образцов с нумерацией, используемой далее в статье, содержится в дополнительных материалах. Измерения проводились на установке терагерцовой спектроскопии “Эпсилон” [27]. В качестве источника непрерывного терагерцового излучения использовались лампы обратной вол-

ны (ЛОВ) с диапазоном частот $50\text{--}500 \text{ ГГц}$. Мощность излучения, прошедшего через образец, регистрировалась пироэлектрическим детектором. Для подавления шумов, электромагнитное излучение модулировалось оптико-механическим модулятором с частотой 23 ГГц .

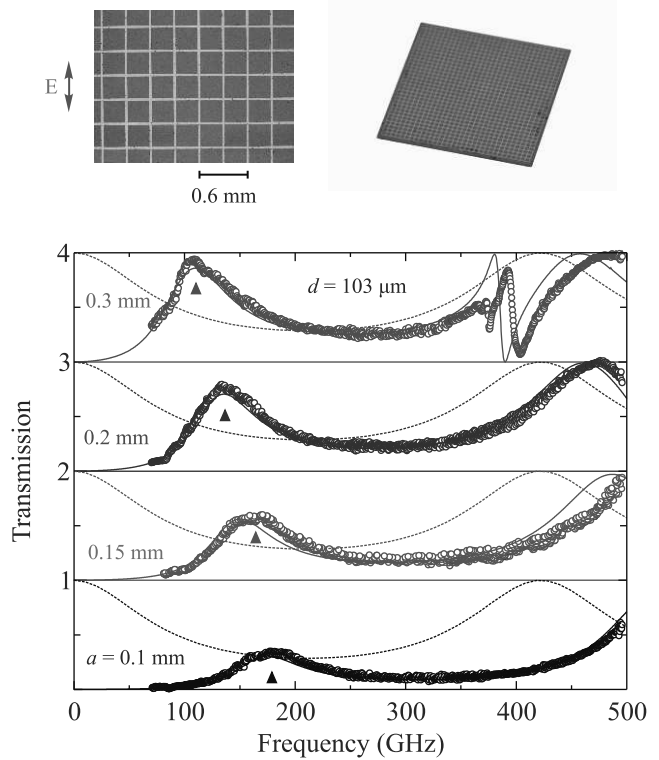


Рис. 1. (Цветной онлайн) Верхняя панель – Схема поверхности образца номер 4 с металлической решеткой ($a = 300 \text{ мкм}$, $w = 30 \text{ мкм}$). Справа приведена фотография исследуемого образца с диагонального ракурса. Нижняя панель – Измеренные спектры пропускания для первых четырех образцов с толщиной кремниевой подложки $d = 103 \text{ мкм}$ и шириной полосок $w = 10 \text{ мкм}$. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности. Сплошными линиями показаны результаты численного расчета для каждой из структур. Пунктиром показаны спектры пропускания чистого кремния без сетки согласно формуле (5). Стелками на рисунке отмечено положение плазменного резонанса в пропускании

На рисунке 1 разным цветом показаны спектры пропускания измеренные для первых четырех образцов с периодами сеток от 100 до 300 мкм . В низкочастотной части спектра появляется резонанс в пропускании, отмеченный для каждой из кривых стрелкой. Для каждого из образцов мы провели численное моделирование пропускания, представленное на графике сплошными линиями. Видно, что эксперимен-

тальные результаты хорошо согласуются с численным расчетом, выполненном в пакете компьютерного моделирования HFSS. Таким образом, металлическая сетка на диэлектрической подложке имеет электромагнитный отклик, похожий на отклик высококачественный ДЭС. Качественно это можно объяснить тем, что металлические полосы, направленные вдоль поляризации падающего излучения, имитируют кинетическую индуктивность двумерной электронной системы. А полосы, перпендикулярные падающей поляризации, не оказывают заметного влияния на спектр пропускания. Подробный анализ данного факта, а также сравнение полученных спектров пропускания со спектрами реальных ДЭС приводятся в дополнительных материалах.

Важно отметить появление дополнительных резонансов в спектре пропускания для структуры с периодом сетки $a = 300$ мкм. Данные резонансы отвечают дифракции падающей электромагнитной волны на металлической сетке. Для образцов с меньшим периодом дифракционные эффекты проявляются на частотах более 500 ГГц.

Для проверки формулы (4) мы построили зависимость частоты наблюдаемых резонансов от обратного периода “решетчатой” метаповерхности, $1/a$ (рис. 2). Заметим, что для решеток с периодом $a = 300$ и 200 мкм частотное положение резонансов хорошо описывается формулой (4). Однако, чем меньше период металлической сетки, тем сильнее становится заметно отклонение частоты резонанса от расчетной формулы. Это связано с нарушением условия $\omega_p \ll \pi c/(\sqrt{\epsilon}d)$. Горизонтальной синей прямой на рис. 2 показана частота $\pi c/(2\sqrt{\epsilon}d)$, равная половине частоты первого резонанса Фабри–Перо диэлектрической подложки. Наблюдаемое отклонение резонанса от расчетной частоты в сторону резонанса подложки вызвано гибридизацией плазмона с модами подложки. Подробно эффекты гибридизации будут исследованы нами во второй части статьи.

Вернемся к экспериментальной проверке формулы (4). Важной особенностью данной зависимости является наличие логарифмического члена в знаменателе. Для проверки этой особенности, мы провели дополнительные эксперименты на образцах, для которых выполняется условие $\omega_p \ll \pi c/(\sqrt{\epsilon}d)$. На образцах с номерами 4, 5 и 6 сетки имели одинаковый период $a = 300$ мкм и различную ширину полосок w . Полученная зависимость частоты плазменного резонанса от w приведена на рис. 3. Видно, что экспериментальные данные хорошо согласуются с теоретической формулой (4) (сплошные линии на рис. 3 и его вставке).

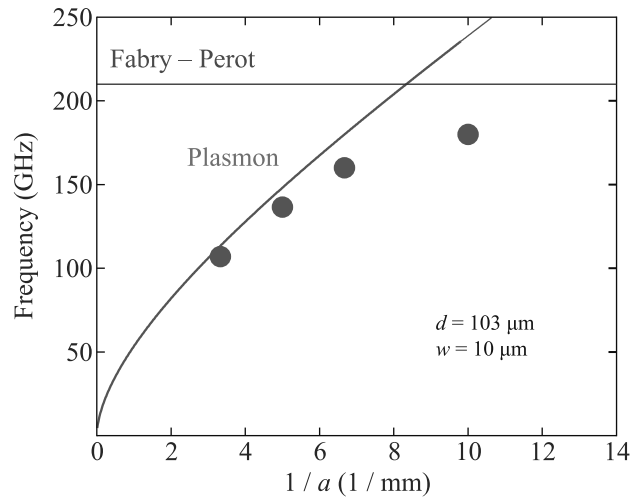


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость частоты резонанса от обратного периода “решетчатой” метаповерхности, $1/a$. Измерения проводились на серии образцов с номерами 1–4. Красной линией (Plasmon) показана теоретическая зависимость для плазменной частоты согласно формуле (4). Горизонтальной синей прямой (Fabry–Perot) показана частота $\pi c/(2\sqrt{\epsilon}d)$, равная половине частоты первого резонанса Фабри–Перо диэлектрической подложки

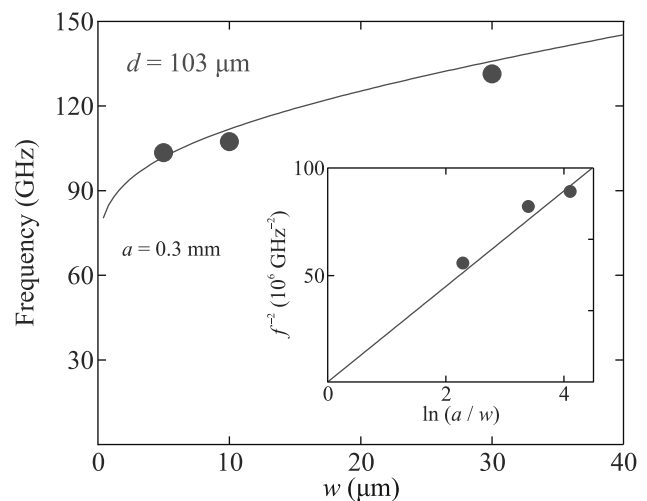


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость частоты плазменного резонанса от ширины полосок w , измеренная для образцов с номерами 4–6. Точками показаны экспериментальные данные. Сплошной линией показана теоретическая зависимость, описанная формулой (4). На вставке приведены те же данные, но по оси абсцисс построено $\ln(a/w)$, а по оси ординат f^{-2} . Точками показаны экспериментальные данные

Вернемся к исследованию гибридизации плазменного резонанса с резонансами диэлектрической подложки. На рисунке 1 пунктирной линией для каж-

дого из образцов показаны спектры пропускания в кремниевой пластине с толщиной d без металлической сетки. Данные спектры имеют аналитическое описание и задаются функцией Фабри–Перо:

$$T_{\text{FP}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\varepsilon} - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega d \sqrt{\varepsilon}}{c} \right)}. \quad (5)$$

Для кремния с $\varepsilon = 11.9$ функция Фабри–Перо представляет собой набор эквидистантных пиков на частотах $\omega_N = N \times \pi c / (\sqrt{\varepsilon} d)$, где $N = 0, 1, 2, \dots$. Из рисунка 1 видно, что добавление металлической сетки на поверхность чипа приводит к существенному сдвигу $N = 0$ пика Фабри–Перо из нулевой частоты. Согласно предложенной модели, данный сдвиг является плазменным эффектом. При этом видно при нарушении условия (4) положение резонанса отклоняется в сторону частоты $\omega_1/2$, где ω_1 – частота первого резонанса Фабри–Перо на кремнии.

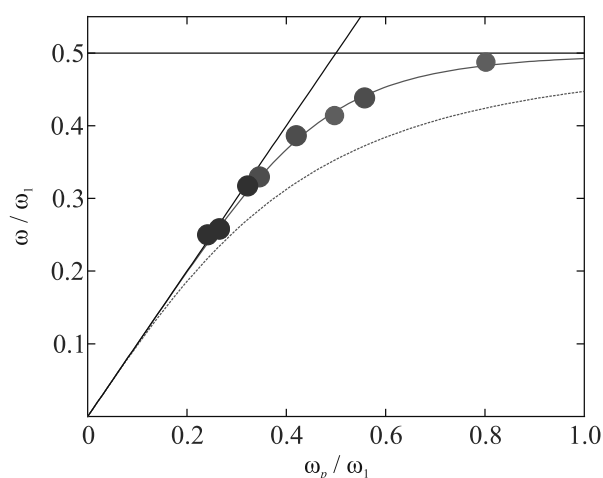


Рис. 4. (Цветной онлайн) Безразмерный график, где по оси абсцисс построено отношение плазменной частоты (4) к частоте первого резонанса Фабри–Перо, ω_p/ω_1 , а по оси ординат – отношение частоты резонанса к частоте первого резонанса Фабри–Перо, ω/ω_1 . Точками разных цветов показаны результаты экспериментов, проведенных на образцах с различной геометрией металлической решетки. Красной пунктирной линией изображена теоретическая зависимость (6), сплошной – экспериментально установленная зависимость (7). Наклонная черная прямая отвечает теоретической формуле (4), горизонтальная черная прямая – $\omega_1/2$

Для полного понимания механизма гибридизации интересно исследовать режим сильной гибридизации, в котором $\omega_p \gg \omega_1/2$. Для этого мы провели дополнительные эксперименты на образцах с номерами 7 и 8 с толщиной подложки $d = 213$ мкм.

Таким образом мы увеличили соотношение $\omega_p/\omega_1/2$. Общие результаты всех экспериментов собраны на сводном рис. 4), построенном в безразмерных координатах. По оси абсцисс приведено отношение плазменной частоты из формулы (4) к частоте первого резонанса Фабри–Перо подложки: ω_p/ω_1 , а по оси ординат – отношение частоты наблюдаемого резонанса к частоте первого резонанса Фабри–Перо: ω/ω_1 . Точками разных цветов показаны данные для разных образцов. Зеленым обозначены результаты для первых трех образцов, синим – для образцов с номерами 4, 5 и 6, красным – образцов 7 и 8. Видно, что экспериментальные данные хорошо согласуются друг с другом и описываются единой зависимостью. В “плазменном” пределе, когда $\omega_p/\omega_1 \rightarrow 0$, положение плазменного резонанса “решетчатой” метаповерхности хорошо описывается формулой (4). В режиме сильного запаздывания, $\omega_p/\omega_1 \rightarrow \infty$, частота плазменного резонанса асимптотически стремится к частоте фотонной моды Фабри–Перо подложки. Частота этой моды составляет $\omega_1/2$.

Гибридизацию плазменного резонанса со световыми модами удобно описывать посредством параметра запаздывания A [28, 29]. Для электромагнитных плазменных мод, которые гибридизуются с модами Фабри–Перо подложки, параметр запаздывания определяется как $A = 2\omega_p/\omega_1$, где ω_1 – частота первого, $N = 1$, резонанса Фабри–Перо. В таком случае частота гибридной плазменной моды для двумерной электронной системы на подложке составляет [18, 19]

$$\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + A^2}}. \quad (6)$$

На рисунке 4 эта зависимость приведена красной пунктирной линией. Видно, что она плохо согласуется с полученными экспериментальными данными. По-видимому, это обусловлено тем, что “решетчатая” метаповерхность физически сильно отличается от сплошной двумерной электронной системы. Однако, интересно отметить, что экспериментальные данные хорошо описываются эмпирической формулой:

$$\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt[4]{1 + A^4}}. \quad (7)$$

На рисунке 4 эта зависимость показана красной сплошной линией.

Таким образом, в настоящей работе было экспериментально исследовано пропускание электромагнитного излучения через кремниевую подложку с металлической квадратной решеткой на поверхности. Установлено, что электродинамический отклик такой структуры аналогичен отклику эффек-

тивной двумерной электронной системы на подложке. Что эквивалентно возбуждению в исследуемой структуре поперечной плазменной моды. Установлено, что эффективная плазменная частота этой моды определяется геометрическими параметрами решетки, толщиной подложки и ее диэлектрической проницаемостью. Была разработана теоретическая модель для качественного описания полученных экспериментальных результатов. Полученные результаты могут быть полезны для разработки новых терагерцевых устройств.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант # 19-72-30003.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18**, 546 (1967).
2. A. V. Chaplik, ZhETF **62**, 746 (1972) [Sov. Phys. JETP **35**, 395 (1972)].
3. C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. **36**, 145 (1976).
4. S. J. Allen, D. C. Tsui, and R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. **38**, 980 (1977).
5. T. N. Theis, J. P. Kotthaus, and P. J. Stiles, Solid State Commun. **24**, 273 (1977).
6. S. J. Allen, H. L. Störmer, and J. C. M. Hwang, Phys. Rev. B. **28**, 4875 (1983).
7. D. B. Mast and A. J. Dahm, Physica B **126**, 457 (1984).
8. D. B. Mast, A. J. Dahm, and A. L. Fetter, Phys. Rev. Lett. **54**, 1706 (1985).
9. D. C. Glatli, E. Y. Andrei, G. Deville, J. Poitrenaud, and F. I. B. Williams, Phys. Rev. Lett. **54**, 1710 (1985).
10. V. V. Popov, O. V. Polischuk, T. V. Teperik, X. G. Peralta, S. J. Allen, N. J. M. Horing, and M. C. Wanke, J. Appl. Phys. **94**, 94, 3556 (2003).
11. A. R. Davoyan, V. V. Popov, and S. A. Nikitov, Phys. Rev. Lett. **108**, 127401 (2012).
12. А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **101**, 602 (2015).
13. D. A. Bandurin, D. Svintsov, I. Gayduchenko, S. G. Xu, A. Principi, M. Moskotin, I. Tretyakov, D. Yagodkin, S. Zhukov, T. Taniguchi, K. Watanabe, I. V. Grigorieva, M. Polini, G. N. Goltsman, A. K. Geim, and G. Fedorov, Nat. Commun. **9**, 5392 (2018).
14. D. Mylnikov and D. Svintsov, Phys. Rev. Appl. **17**, 064055 (2022).
15. А. А. Заболотных, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ **115**, 163 (2022).
16. Ю. А. Косевич, Письма в ЖЭТФ **53**, 143 (1991).
17. В. А. Волков, В. Н. Павлов, Письма в ЖЭТФ **99**, 99 (2014).
18. P. A. Gusikhin, V. M. Muravev, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **102**, 121404(R) (2020).
19. A. Shuvaev, V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, J. Gospodarič, A. Pimenov, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. Lett. **126**, 136801 (2021).
20. A. S. Astrakhantseva, A. Shuvaev, P. A. Gusikhin, A. Pimenov, I. V. Kukushkin, and V. M. Muravev, Appl. Phys. Lett. **120**, 031104 (2022).
21. J. Brown, Proc. IEEE **100**, 51 (1953).
22. W. Rotman, IRE Trans. Antennas Propag. **10**, 17 (1962).
23. J. B. Pendry, A. J. Holden, W. J. Stewart, and I. Youngs, Phys. Rev. Lett. **76**, 4773 (1996).
24. J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 4785 (1998).
25. D. R. Smith, D. C. Vier, Willie Padilla, Syrus C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, Appl. Phys. Lett. **75**, 1425 (1999).
26. P. Gay-Balmaz, C. Maccio, and J. F. Martin, Appl. Phys. Lett. **81**, 2896 (2002).
27. G. Kozlov and A. Volkov, *Topics in Applied Physics, v. 74, Millimeter and submillimeter Wave Spectroscopy of Solids*, ed. by G. Gruner, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1998).
28. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, S. A. Mikhailov, D. V. Kulakovskii, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **90**, 156801 (2003).
29. S. A. Mikhailov and N. A. Savostianova, Phys. Rev. B **71**, 035320 (2005).

Многощелевая сверхпроводимость немагнитного стехиометрического пниктида $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$

Т. Е. Кузьмичева⁺¹⁾, С. А. Кузьмичев^{*+,} А. С. Медведев⁺

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

^{*}Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 марта 2024 г.

После переработки 14 апреля 2024 г.

Принята к публикации 18 апреля 2024 г.

С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений, реализованного в планарных контактах на микротрещине, исследована щелевая структура пниктидов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (семейство 1144), переходящих в сверхпроводящее состояние в стехиометрическом составе при критической температуре $T_c \approx 36.1$ К. Показано сосуществование трех объемных параметров сверхпроводящего порядка Δ_i , при $T \ll T_c$ напрямую определены их амплитуды и соответствующие характеристические отношения $2\Delta_i(0)/k_B T_c \approx 5.6, 3.9$ и 1.3 . Проведено сравнение щелевой структуры $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и родственных пниктидов семейств 1144 и 122, исследованных нами ранее.

DOI: 10.31857/S1234567824100082, EDN: YHCKIA

1. Введение. Недавно открытое семейство 1144 сверхпроводящих (СП) пниктидов железа, типичным представителем которого является $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ [1], – полный стехиометрический аналог системы BaFe_2As_2 (так называемое семейство 122). Присутствие чередующихся вдоль c -направления неэквивалентных 122-блоков $\text{Ca-FeAs-K-FeAs-}\dots$, обладающих тетрагональной структурой, осуществляет дырочное “самодопирование” [2]. Таким образом, $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ переходит в СП состояние в стехиометрическом составе и обладает оптимальными от природы СП свойствами без присутствия нематических флуктуаций [3], а также не имея структурных и магнитных переходов вплоть до $T \sim 300$ К [4].

Зонные расчеты [5–7] показали, что на поверхности Ферми $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ присутствуют около 10 листов, из которых методом фотоэмиссионной спектроскопии углового разрешения надежно различимы пять: три дырочных цилиндра вокруг Γ -точки зоны Бриллюэна и два электронных цилиндра в M -точке [7].

Ввиду отсутствия прямых измерений, данные литературы о щелевой структуре $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ на сегодня немногочисленны и разрознены: нет единого мнения ни о количестве, ни о величинах СП параметров порядка. Например, разброс экспериментальных значений характеристического отношения $2\Delta_L(0)/k_B T_c$ для большой СП щели составляет $3.7\text{--}9.0$ [7–11]. Оптическая спектроскопия [8] и изме-

рения плотности СП конденсата $\rho_S(T)$ [9, 10] показали наличие двух СП щелей. С другой стороны, авторы работы [11] утверждают, что для аппроксимации $\rho_S(T)$ необходима 5-щелевая модель. Имеющиеся спектры туннельных контактов на основе $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ [9] демонстрируют сильно размытые щелевые особенности, которые могут быть описаны в рамках теоретических моделей только при вводе сильного разброса значений СП щелей в реальном пространстве (до 100 %).

В данной работе с помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (ЭНМАО) планарных контактов на микротрещине напрямую определены величины СП параметров порядка $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ при $T \ll T_c$ и их характеристические отношения. Показано сходство щелевой структуры $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и его структурных аналогов: пниктидов $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ семейства 1144 с магнитным переходом при $T < T_c$ и $\text{Ba(Fe,Ni)}_2\text{As}_2$, исследованных нами ранее.

2. Детали эксперимента. Синтез соединения состава $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ проводился из подготовленных заранее прекурсоров CaAs (Ca , 99.9 %, + As , 99.9999 %), KAs (K , 99.95 %, + As , 99.9999 %) и Fe_2As (Fe , 99.98 %, + As , 99.9999 %) в мольном соотношении 1:1:2. Прекурсор CaAs синтезировали в корундовом тигле из исходных реагентов Ca и As в ниобиевом контейнере в атмосфере аргона при температуре 800°C в течение 48 ч. Прекурсор KAs синтезировали в агатовой ступке на плите при температуре 150°C , постепенно добавляя порошок

¹⁾e-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

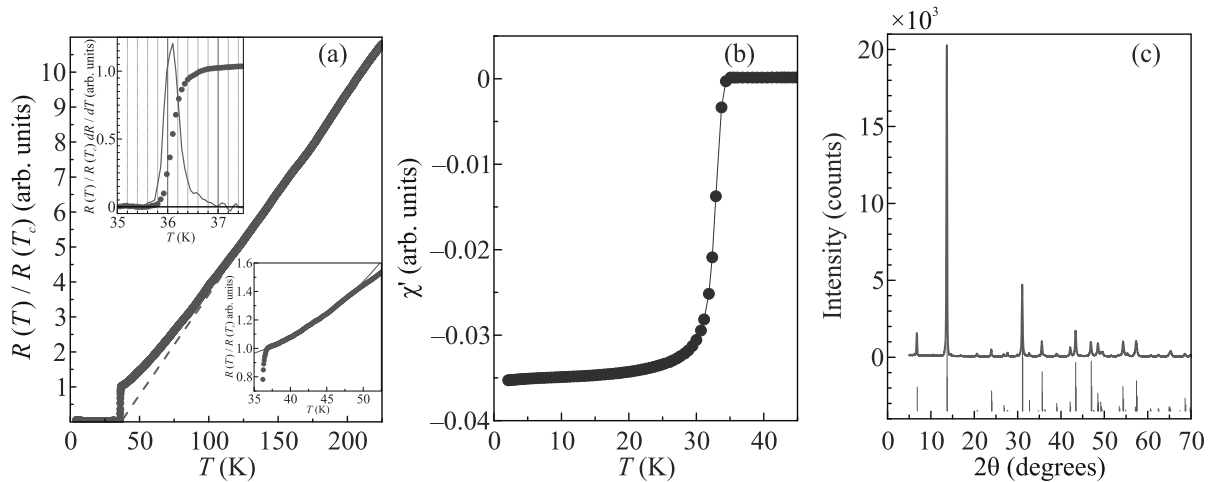


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Температурная зависимость сопротивления поликристалла $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$. Штриховой линией показана аппроксимация $R(T)$ при высоких температурах. На верхней вставке показан СП переход (кружки), а также зависимость $dR(T)/dT$ (линия), максимум которой определяет объемную $T_c \approx 36.1$ К. (б) – Температурная зависимость действительной части магнитной восприимчивости. (с) – Порошковая дифрактограмма поликристалла $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (сплошная линия) и ожидаемое положение пиков от фазы 1144 (вертикальные штрихи)

As в расплавленный К. Элементы Fe и As в виде дроби в стехиометрическом соотношении закладывали в кварцевую ампулу, после чего ампулу отжигали в печи при $T = 900^\circ\text{C}$ в течение 96 ч. Синтезированные прекурсоры размалывали и перемешивали в агатовой ступке, полученную смесь засыпали в корундовый тигель, который заваривали в ниобиевый контейнер. Контейнер помещали в вакуумную печь и прокаливали в атмосфере аргона при температуре 890°C в течение 6 ч. Полученный порошок перетирали в агатовой ступке и прессовали в таблетки диаметром 12 мм, которые затем помещали в ниобиевый контейнер и заваривали при помощи аргонодуговой сварки в атмосфере аргона. Контейнер помещали в вакуумную печь и прокаливали при температуре 890°C в течение 6 ч в атмосфере аргона. Все операции синтеза, кроме прокаливания, были проведены в перчаточном боксе в атмосфере аргона и содержанием кислорода и воды менее чем 0.1 ppm.

Измерения температурной зависимости сопротивления, проведенные четырехточечным методом, показали достаточно резкий СП переход (рис. 1а), детали которого приведены на верхней вставке. Критическая температура объемного поликристалла $T_c^{\text{bulk}} \approx 36.1$ К определена, исходя из положения максимума производной $dR(T)/dT$. Относительно небольшая ширина СП перехода $\Delta T_c \approx 0.8$ К $\approx 0.02T_c$, а также высокое отношение $R(225\text{ K})/R(T_c) \approx 11$ демонстрирует высокое качество образца и однородность его свойств. В

соответствии с классической формулой Блоха–Грюнайзена, в нормальном состоянии в диапазоне $0.15T_D \lesssim T \lesssim 0.2T_D$ (при температуре Дебая $T_D \approx 250$ К [12], для $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$, таким образом, $0.15T_D \approx T_c$) экспериментальная кривая $R(T)$ аппроксимируется степенной функцией $R \propto T^4 + \text{const}$ (нижняя вставка к рис. 1а), а при высоких температурах $T \gtrsim 0.5T_D$ стремится к линейной зависимости (штриховая линия на рис. 2а). Структурный и магнитный переходы выше T_c отсутствуют.

Температурная зависимость магнитной восприимчивости на переменном токе (рис. 2б) содержит СП переход при $T_c \approx 35.1$ К и не имеет каких-либо особенностей ниже T_c . На порошковой дифрактограмме, показанной на рис. 2с, присутствуют только рефлексy, относящиеся к целевой фазе (см. штрихи красного цвета), и отсутствуют явные рефлексy примесных фаз, что говорит об однофазности синтезированного образца. Элементный состав полученного поликристаллического образца был исследован методом энергодисперсионной спектроскопии с помощью приставки INCA X-Act к электронному микроскопу JEOL 7001F. Массовое соотношение элементов Ca, K, Fe и As составило 6.29 %, 6.47 %, 37.42 % и 49.82 %, соответственно, что соответствует формуле $\text{Ca}_{0.94}\text{K}_{0.99}\text{Fe}_{4.01}\text{As}_{3.98}$.

С помощью техники “break-junction” [13] создавались механически регулируемые планарные контакты на микротрещине (MCPBJ) типа S-n-I-n-S (S – сверхпроводник, n – тонкий нормальный металл, I – изолятор). Конструкция измерительного столика и

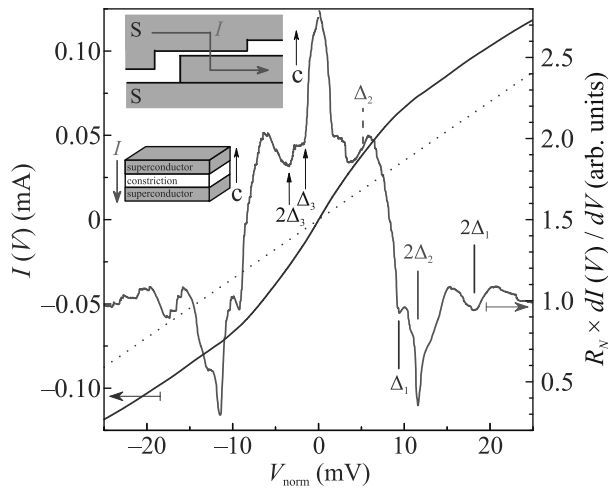


Рис. 2. (Цветной онлайн) ВАХ (линия синего цвета, левая вертикальная ось) и спектр динамической проводимости (линия красного цвета, правая ось) SnS -андреевского контакта, полученного в поликристалле $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ при $T \approx 2.5$ К. Пунктиром показана соответствующая омическая $I(V)$ -зависимость при $T > T_c$. Монотонный ход $dI(V)/dV$ в нормальном состоянии подавлен для удобства рассмотрения. Вертикальными штрихами отмечены положения андреевских субгармоник от СП параметров порядка $\Delta_1 \approx 9.1$ мэВ и $\Delta_2 \approx 5.8$ мэВ, стрелками – от предположительной малой СП щели $\Delta_3 \approx 1.8$ мэВ при $T \ll T_c$. Штриховой вертикальной линией показано ожидаемое положение второй субгармоники от Δ_2 . На вставке показана схема образования планарного контакта на микротрещине на ступеньках и террасах слоистого образца

детали эксперимента, преимущества и недостатки метода МСРВJ и его применимость к поликристаллам слоистых соединений подробно описаны в обзоре [14]. Метод заключается в прецизионном создании микротрещины в образце при 4.2 К с образованием двух криогенных сколов, разделенных туннельным барьером (ScS , где $c \equiv nIn$ – слабая связь).

Нами неоднократно было показано, что с помощью техники МСРВJ в поликристаллах слоистых соединений возможно раскалывание отдельных кристаллических зерен (в которых кристаллографическое ab -направление примерно параллельно микротрещине) с образованием ступенек и террас на поверхности таких зерен (подобные изображения, полученные с помощью электронного микроскопа, приведены на рис. 2 в [14], рис. 1 в [15]). В таком контакте (аналогично созданному в слоистом монокристалле) при тонкой механической регулировке можно ожидать скольжение криогенных сколов друг относительно друга вдоль террас в ab -плоскости с изменением площади и нормального сопротивления кон-

такта R_N , а также образование стопочных структур $\text{ScSc} \dots \text{S}$ – цепочки ScS -контактов с эквивалентным R_N (см. раздел 2.3 в [14]). При такой геометрии измерительный ток протекает через контакт вдоль c -направления. Физическая модель контакта, образованного на ступеньках и террасах слоистого кристалла, схематически приведена на вставке к рис. 2.

В СП состоянии в S-n-I-n-S -контакте реализуется эффект многократных андреевских отражений (МАО) [16–21]. В случае высокой прозрачности слоя изолятора I ($T \gtrsim 85\%$, что соответствует силе барьера $Z \lesssim 0.3$) и отсутствию фазовой когерентности между СП берегами (так называемый “длинный контакт”) [16, 17] андреевский транспорт вызывает на вольтамперной характеристике (ВАХ) контакта избыточный ток $I_{\text{exc}} \equiv I(V, T) - I(V, T_c)$ во всем диапазоне смещений eV (т.е. относительно нормальной ВАХ выше T_c). На $dI(V)/dV$ -спектре такого контакта при $eV \rightarrow 0$ наблюдается повышенная (однако, конечная) динамическая проводимость относительно проводимости в нормальном состоянии $G_N \equiv 1/R_N$ (образуя так называемый пьедестал), при этом сверхтоковая ветвь отсутствует [16–21].

Амплитуда СП параметра порядка Δ напрямую определяется из положений минимумов субгармонической щелевой структуры (СГС) при любых температурах вплоть до T_c [16–20]:

$$|eV_n(T)| = 2\Delta(T)/n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Число наблюдаемых минимумов СГС уменьшается с увеличением параметра размытия Γ , а также при уменьшении баллистического отношения l/d (l – длина свободного пробега, d – размер контакта) [17, 21]. Для многощелевого сверхпроводника на $dI(V)/dV$ -спектре будут присутствовать СГС от каждой щели.

Для слоистых материалов характерно образование не только одиночных ScS -контактов, но и стопочных структур $\text{ScSc} \dots \text{S}$ [14]. На спектре стопки, состоящей из m последовательно подключенных эквивалентных ScS -контактов, положение СГС будет увеличено в m раз: $|eV_n(T)| = 2m\Delta(T)/n$, $n, m = 1, 2, \dots$. Число контактов в стопке до $m \lesssim 15$ может быть однозначно определено с помощью набора статистики $I(V)$ и $dI(V)/dV$ -характеристик различных стопок путем подбора *небольших целых чисел* m , на которые необходимо нормировать оси смещений $dI(V)/dV$ -спектров так, чтобы положение всех особенностей, вызванных объемными СП свойствами, совпало (детали см. в [22, 23]). Аналогичная процедура была проведена для стопочных ScS -контактов, представленных ниже; для удобства, на

рис. 2–4 ось смещений нормирована на полученные целые числа m ($V_{\text{norm}} \equiv V/m$).

3. Экспериментальные данные. На рисунке 2 приведены типичные ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектр стопочного контакта на микротрещине ($m = 6$), получаемого в поликристаллах $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ при $T \ll T_c$. ВАХ практически симметрична относительно нуля, не имеет сверхтоковой ветви и гистерезиса; вместо этого наблюдается заметный избыточный ток по сравнению с нормальной (омической) ВАХ для $T > T_c$ во всем диапазоне смещений. Указанные особенности $I(V)$ -характеристики однозначно определяют реализацию некогерентного режима МАО и довольно высокую прозрачность барьера, согласно всем имеющимся моделям МАО [16, 18–20].

При рассмотрении $dI(V)/dV$ -спектра на рис. 2 в сторону уменьшения смещения, первые два минимума, наблюдаемые при $|eV| \approx 18.2$ и 11.6 мэВ, являются фундаментальными ($n = 1$) андреевскими гармониками от СП параметров порядка $2\Delta_1 \approx 18.2$ мэВ и $\Delta_2 \approx 11.6$ мэВ при $T \ll T_c$ и составляют дублет. Следующий минимум при $|eV| \approx 9.1$ мэВ, согласно формуле (1), может быть интерпретирован как вторая ($n = 2$) субгармоника от Δ_1 . Положения минимумов при малых смещениях $|eV| \approx 3.6$ и 1.8 мэВ (стрелки на рис. 2) не соответствуют субгармоникам высших порядков $n \geq 3$ от $\Delta_{1,2}$, поэтому могут быть интерпретированы как образующие вторую СГС, предположительно, от малой СП щели $2\Delta_3 \approx 3.6$ мэВ. Ожидаемое положение $n = 2$ субгармоники от $\Delta_2 \approx 5.8$ мэВ (штриховая линия на рис. 2) близко к позиции фундаментальной андреевской особенности при $2\Delta_3$, что, по всей вероятности, приводит к уширению последней и невозможности уверенно различить первую.

Набор нормированных ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектров (соответствующими цветами) различных стопочных контактов с $R_N \approx 40$ – 230 Ом, полученных при $T \ll T_c$ в образцах $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ из одной закладки, показан на рис. 2 (данные красного цвета аналогичны приведенным на рис. 3). Хорошо видно, что несмотря на изменение R_N (которое можно оценить по наклону ВАХ при $eV \gg 2\Delta$) и, следовательно, площади контакта, положения дублетной фундаментальной андреевской гармоники, соответствующие СП параметрам порядка $2\Delta_1$ и $2\Delta_2$, воспроизводятся (вертикальные области светло-синего и фиолетового цвета на рис. 3b). Для двух нижних спектров ($m = 2, 3$) также воспроизводится и форма дублета. Таким образом, наблюдаемые особенности отражают объемные СП свойства $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$. Отметим, что на спектрах, приведенных на рис. 3b, был подавлен монотон-

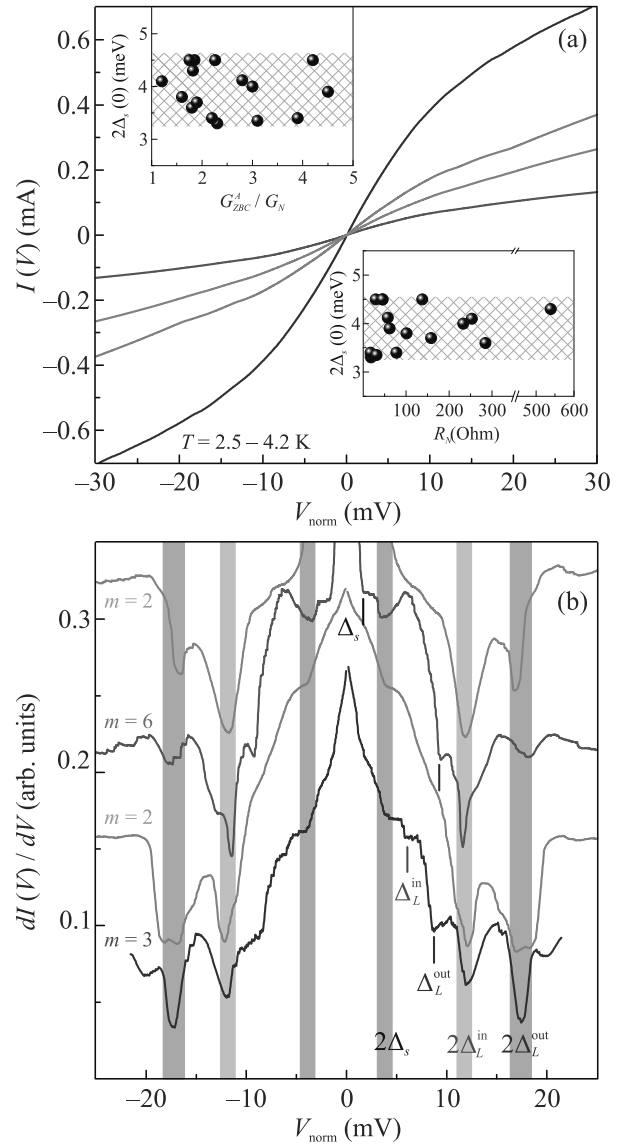


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – ВАХ и (b) – $dI(V)/dV$ -спектры (приведены соответствующими цветами) андреевских SnS-контактов, полученных в поликристаллах $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ из одной закладки при $T \ll T_c$. Для каждого контакта ось смещений $I(V)$ и $dI(V)/dV$ -характеристик нормирована на число контактов m , указанное на рисунке. Монотонный ход $dI(V)/dV$ в нормальном состоянии подавлен для удобства рассмотрения. Вертикальные области отмечают воспроизводящиеся положения фундаментальных гармоник от СП параметров порядка Δ_1 , Δ_2 и, предположительно, Δ_3 ; вертикальные штрихи – ожидаемые положения вторых субгармоник. На вставках к панели (a) показано положение особенности $dI(V)/dV$, интерпретированной как $2\Delta_3$, от андреевской проводимости при нулевом смещении $G_{ZBC}^A \equiv (G_{ZBC}/G_N - 1)$ (верхняя вставка) и нормального сопротивления контакта R_N (нижняя вставка)

ный ход путем деления на $dI(V)/dV$ в нормальном состоянии. Такая математическая процедура приводит к формальному выравниванию электронной плотности состояний вблизи уровня Ферми и приведению спектров к классическому виду.

Особенности, отмеченные на рис. 3b вертикальными штрихами, расположенные на вдвое меньших смещениях, чем соответствующие фундаментальные гармоники от Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 , и не превышающие их по амплитуде, с большой долей вероятности, являются вторыми ($n = 2$) субгармониками от данных СП щелей.

Согласно данным рис. 3b, $2\Delta_1 \approx 17.4 \pm 1.0$ мэВ, $2\Delta_2 \approx 12.1 \pm 0.9$ мэВ при $T \ll T_c$. Соответствующие характеристические отношения $r_i \equiv 2\Delta_i/k_B T_c^{\text{bulk}}$ составляют $r_1 \approx 5.6 \pm 0.3$, $r_2 \approx 3.9 \pm 0.3$ и превышают БКШ-предел слабой связи 3.53. Полученные величины r_1 и r_3 близки к оцененным в работах [9, 10] с помощью анализа температурной зависимости $\rho_S(T)$.

Особенности при малых смещениях $|eV| \approx \approx 3.8$ мэВ наблюдаются на большинстве полученных $dI(V)/dV$ -спектров, хотя слабо выражены и имеют очень малую амплитуду. Эти особенности можно отнести к фундаментальной андреевской гармонике от малой СП щели $2\Delta_3$, руководствуясь следующими фактами. Во-первых, на $dI(V)/dV$ -спектрах некоторых контактов также присутствует вторая $n = 2$ субгармоника, расположенная на вдвое меньшем смещении (в качестве примера см. рис. 2). Во-вторых, согласно полученной статистике на вставках к рис. 3а, положение рассматриваемой особенности (предполагаемая амплитуда $2\Delta_3$) не коррелирует ни с R_N контакта, ни с его андреевской проводимостью при нулевом смещении $G_{ZBC}^A \equiv (G_{ZBC}/G_N - 1)$ (G_{ZBC} – полная динамическая проводимость при $eV \rightarrow 0$), следовательно, не зависит от геометрических размеров контакта, и не может быть вызвано размерными резонансами.

Полученные величины $2\Delta_3 \approx 3.9 \pm 0.7$ мэВ, соответствующие диапазону характеристических отношений $r_3 \approx 1.3 \pm 0.3$, имеют гораздо больший разброс по сравнению с таковыми для $\Delta_{1,2}$. Вероятно, значительная относительная погрешность связана со слабой выраженностью данных особенностей на $dI(V)/dV$ -спектрах SnS-контактов, либо со значительной вариацией силы межзонного взаимодействия от одной контактной точки к другой. В качестве возможных причин подавления СГС от предположительной Δ_3 можно указать малую длину свободного пробега, значительную амплитуду неупругого рассеяния Γ в зонах с этим СП параметром порядка и силу барьера $Z \sim 1$, низкую концентрацию

носителей заряда в соответствующих зонах, а также анизотропию или даже наличие точек нулей Δ_3 в k -пространстве.

4. Обсуждение. Проведем сравнение структуры СП параметра порядка $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и родственных соединений структурного типа 122, имеющих схожую топологию поверхности Ферми. Дублетные андреевские особенности на $dI(V)/dV$ -спектрах, аналогичные наблюдаемым на рис. 2, 3, были получены нами ранее с помощью ЭНМАО-спектроскопии в пниктидах $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ [24, 25] с магнитным переходом ниже T_c и $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ с вариацией степени допирования [23, 26, 27].

СП щелевая структура данных пниктидов схожа. На рисунке 4 приведены ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектры SnS-контактов на микротрещине, полученных в $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (красного цвета, данные взяты с рис. 2), оптимально допированном $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ (желтого цвета, локальная критическая температура контакта $T_c^{\text{local}} \approx 20$ К) и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_2$ (синего цвета, $T_c^{\text{local}} \approx 35$ К). Из-за различия в T_c и, соответственно, в энергии связи куперовских пар данных соединений, ось смещений для каждой $I(V)$ и $dI(V)/dV$ -характеристики на рис. 4 нормирована на соответствующую величину большего СП параметра порядка Δ_1 ; ток нормирован на $I_0 \equiv \Delta_1/eR_N$ при $T \ll T_c$. Как видно из рис. 4b, при такой нормировке избыточный ток на ВАХ при $eV \gg 2\Delta$ стремится к постоянному значению (относительно штриховой линии $y = x$). Несмотря на изменение амплитуды избыточного андреевского тока при больших смещениях $I_{\text{exc}} \cdot eR_N \approx (0.3-2.3)\Delta_0$ (зависящее от свойств контактной области: l/d , Z и Γ), положение фундаментальных андреевских особенностей на соответствующих $dI(V)/dV$ -спектрах от трех наблюдаемых СП параметров порядка воспроизводится (рис. 4а). Это указывает на примерно одинаковое соотношение $\Delta_1 : \Delta_2 : \Delta_3$ для всех исследованных соединений.

Два больших СП параметра порядка Δ_1 и Δ_2 , составляющие дублет, могут относиться как к разным СП конденсатам (две отдельные изотропные СП щели $\Delta_{L1} \equiv \Delta_1$ и $\Delta_{L2} \equiv \Delta_2$, открывающиеся в разных зонах ниже T_c), так и к единому конденсату с $\Delta_L(\theta)$, обладающему анизотропией СП свойств в импульсном пространстве (θ – угол в $k_x k_y$ -плоскости). В последнем случае $\Delta_1 \equiv \Delta_L^{\text{out}}$ и $\Delta_2 \equiv \Delta_L^{\text{in}}$ являются максимальной и минимальной энергиями связи куперовских пар в k -пространстве в зонах, где ниже T_c образуется данный анизотропный СП конденсат. Хотя для прямого установления анизотропии Δ_L в k -пространстве необходимо проведение более детальных исследований формы дублетов на $dI(V)/dV$ -

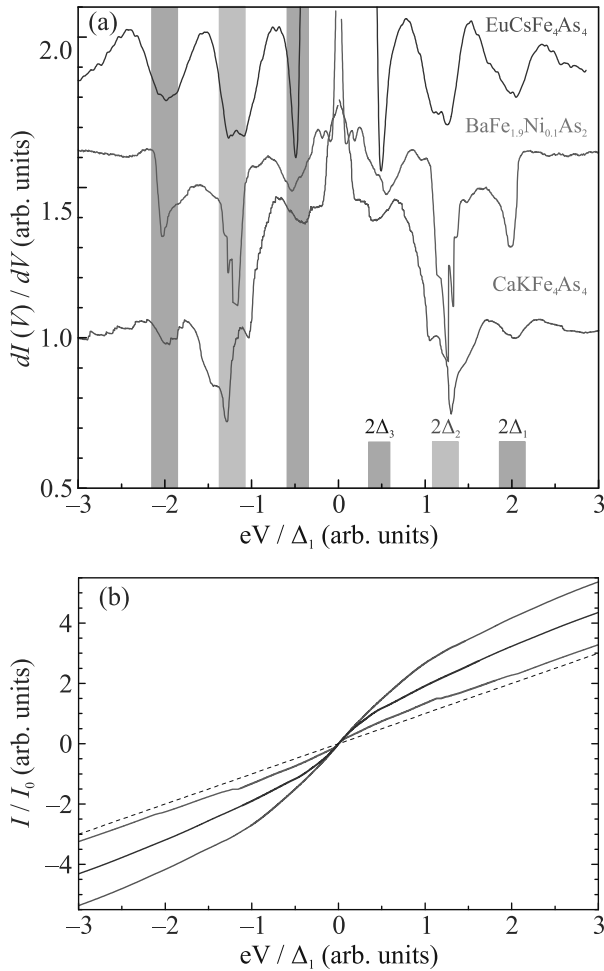


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сравнение $dI(V)/dV$ -спектров (а) и ВАХ (б) андреевских SnS-контактов, полученных нами в железосодержащих пниктидах стехиометрического типа 122: $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ (синего цвета, данные взяты из работы [25]), оптимально допированном $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ (желтого цвета, данные взяты из [26]) и $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (красного цвета, данные с рис. 2). Монотонный ход в нормальном состоянии на (а) подавлен для удобства рассмотрения. Вертикальные области отмечают положения фундаментальных гармоник от СП параметров порядка Δ_1 , Δ_2 и Δ_3 . Для каждого контакта ось смещений нормирована на соответствующее значение Δ_1 , ось тока нормирована на $I_0 \equiv \Delta_1/eR_N$ при $T \ll T_c$. Прямая $y = x$ приведена на панели (б) штриховой линией для сравнения

спектрах SnS-контактов, в работах [23, 25] на основе анализа данных ЭНМАО-спектроскопии образцов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ приведен ряд косвенных аргументов в пользу данного предположения. В этом случае, оценка величины анизотропии большой СП щели в $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ дает величину $A_L \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta_2/\Delta_1] \approx 30\%$.

Оцененные выше величины характеристических отношений для $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ также близки к r_i , определенным нами ранее в $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ [23, 26, 27] и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_2$ [24, 25]. Сравнение СП свойств $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_2$ с близкими $T_c \approx 36\text{--}37\text{ K}$ показало, что наличие магнитного упорядочения в Eu^{2+} -плоскостях $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ слабо влияет на характеристические отношения энергетических СП параметров и механизм спаривания. Можно сделать вывод о сходстве свойств СП подсистем пниктидов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_2$ семейства 1144 с таковыми для $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ родственного семейства 122 и реализации одновременного масштабирования (скейлинга) амплитуд Δ_i с T_c в исследованных сверхпроводниках.

5. Заключение. С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений, проведенной на планарных стопочных SnS-контактах на микротрещине, исследованы свойства СП подсистемы поликристаллов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ с объемной критической температурой $T_c^{\text{bulk}} \approx 36.1\text{ K}$. При $T \ll T_c$ напрямую определены амплитуды трех объемных СП параметров порядка Δ_1 , Δ_2 и предположительной малой СП щели Δ_3 с характеристическими отношениями 5.6, 3.9 и 1.3, соответственно. Показано сходство СП свойств пниктидов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$, $\text{EuCsFe}_4\text{As}_2$ семейства 1144 и $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ родственного семейства 122, а также реализация скейлинга амплитуд Δ_i с T_c в исследованных сверхпроводниках.

Авторы выражают благодарность К. С. Первакову и В. А. Власенко за полезные обсуждения. Измерения частично проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках проекта # 075-5-2021-1353 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. A. Iyo, K. Kawashima, T. Kinjo, T. Nishio, S. Ishida, H. Fujihisa, Y. Gotoh, K. Kihou, H. Eisaki, and Y. Yoshida, J. Am. Chem. Soc. **138**, 3410 (2016).
2. K. Kawashima, T. Kinjo, T. Nishio, S. Ishida, H. Fujihisa, Y. Gotoh, K. Kihou, H. Eisaki, Y. Yoshida, and A. Iyo, J. Phys. Soc. Jpn **85**, 064710 (2016).
3. W.-L. Zhang, W. R. Meier, T. Kong, P. C. Canfield, and G. Blumberg, Phys. Rev. B **98**, 140501(R) (2018).
4. W. R. Meier, T. Kong, U. S. Kaluarachchi, V. Taufour, N. H. Jo, G. Drachuck, A. E. Böhrer, S. M. Saunders,

- A. Sapkota, A. Kreyssig, M. A. Tanatar, R. Prozorov, A. I. Goldman, F. F. Balakirev, A. Gurevich, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* **94**, 064501 (2016).
5. F. Lochner, F. Ahn, T. Hickel, and I. Eremin, *Phys. Rev. B* **96**, 094521 (2017).
6. D. V. Suetin and I. R. Shein, *J. Supercond. Novel Magn.* **31**, 1683 (2018).
7. D. Mou, T. Kong, W. R. Meier, F. Lochner, L.-L. Wang, Q. Lin, Y. Wu, S. L. Bud'ko, I. Eremin, D. D. Johnson, P. C. Canfield, and A. Kaminski, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 277001 (2016).
8. R. Yang, Y. Dai, B. Xu, W. Zhang, Z. Qiu, Q. Sui, C. C. Homes, and X. Qiu, *Phys. Rev. B* **95**, 064506 (2017).
9. K. Cho, A. Fente, S. Teknowijoyo, M. A. Tanatar, K. R. Joshi, N. M. Nusran, T. Kong, W. R. Meier, U. Kaluarachchi, I. Guillamón, H. Suderow, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, and R. Prozorov, *Phys. Rev. B* **95**, 100502(R) (2017).
10. P. K. Biswas, A. Iyo, Y. Yoshida, H. Eisaki, K. Kawashima, and A. D. Hillier, *Phys. Rev. B* **95**, 140505(R) (2017).
11. R. Khasanov, W. R. Meier, Y. Wu, D. Mou, S. L. Bud'ko, I. Eremin, H. Luetkens, A. Kaminski, P. C. Canfield, and A. Amato, *Phys. Rev. B* **97**, 140503(R) (2018).
12. S. L. Bud'ko, T. Kong, W. R. Meier, X. Ma, and P. C. Canfield, *Phil. Mag.* **97**, 2689 (2017).
13. J. Moreland and J. W. Ekin, *J. Appl. Phys.* **58**, 3888 (1985).
14. S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, *Low Temp. Phys.* **42**, 1008 (2016).
15. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, V. M. Pudalov, and N. D. Zhigadlo, *Phys. Rev. B* **95**, 094507 (2017).
16. M. Octavio, M. Tinkham, G. E. Blonder, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **27**, 6739 (1983).
17. R. Kümmel, U. Günsenheimer, and R. Nicolsky, *Phys. Rev. B* **42**, 3992 (1990).
18. U. Günsenheimer and A. D. Zaikin, *Phys. Rev. B* **50**, 6317 (1994).
19. G. B. Arnold, *J. Low Temp. Phys.* **68**, 1 (1987).
20. D. Averin and A. Bardas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1831 (1995).
21. Z. Popović, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, *J. Appl. Phys.* **128**, 013901 (2020).
22. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, and N. D. Zhigadlo, *Phys. Rev. B* **100**, 144504 (2019).
23. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, *Phys. Rev. B* **104**, 174512 (2021).
24. S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, A. Yu. Degtyarenko, S. Yu. Gavrilkin, and T. E. Kuzmicheva, *JETP Lett.* **116**, 723 (2022).
25. T. Kuzmicheva, K. Pervakov, V. Vlasenko, A. Degtyarenko, and S. Kuzmichev, *J. Supercond. Novel Magn.* **37**, 379 (2024).
26. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, *JETP Lett.* **112**, 786 (2020).
27. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, *JETP Lett.* **118**, 514 (2023).

Antiferromagnetic-to-ferromagnetic transition in the $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ compound

R. D. Mukhachev⁺¹⁾, A. V. Lukyanov⁺, A. G. Kuchin⁺

⁺*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620108 Ekaterinburg, Russia*

^{*}*Institute of Physics and Technology,*

Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, 620002 Ekaterinburg, Russia

Submitted 11 March 2024

Resubmitted 15 April 2024

Accepted 18 April 2024

DOI: 10.31857/S1234567824100094, EDN: YZQZRX

Ternary intermetallics RTX where R – a rare-earth metal and T, X – *d* or *p*-elements are being actively investigated because of many interesting properties, such as: giant and large magnetocaloric effect (MCE) and magnetoresistance, metamagnetic transitions, etc. [1, 2]. There are many RTX compounds with magnetic ordering temperatures near room temperature and above, some RNiSi are reported to have giant or large MCE [3]. The gadolinium-based GdTX are of particular interest not only due to MCE, but also due to the variety of structures and magnetic properties [4, 5]. It was found that doping most GdTX compounds can improve their magnetic and other properties [1, 6]. There are transitions that depend on changes in composition, for example, in $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ [7]. Recently, the Al-doped $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ system was first synthesized and experimentally studied in order to improve its magnetocaloric properties, it was found to almost double the values of the relative cooling power for $x = 0.2$ [8].

In this work, the electronic structure and magnetic properties of $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ have been investigated within the framework of theoretical DFT + *U* method in Quantum ESPRESSO package [9]. Strong electron correlations in the Gd 4*f* shell were taken into account in the GGA + *U* approach for the Coulomb parameter as 6.7 eV and Hund parameter as 0.7 eV [1, 7]. The densities of states calculated for GdNiSi are shown in Fig. 1a, b. The total density of two Gd types forming the antiferromagnetic (AFM) ordering are plotted in fig. 1a with the most intense peaks from –8 to –7 eV and from 4.5 to 5.5 eV, symmetrically for both spin projections. Below the Fermi level, from –3 to 0 eV, there are highly intense, symmetrical peaks of the 3*d* states of nickel, indicated in orange.

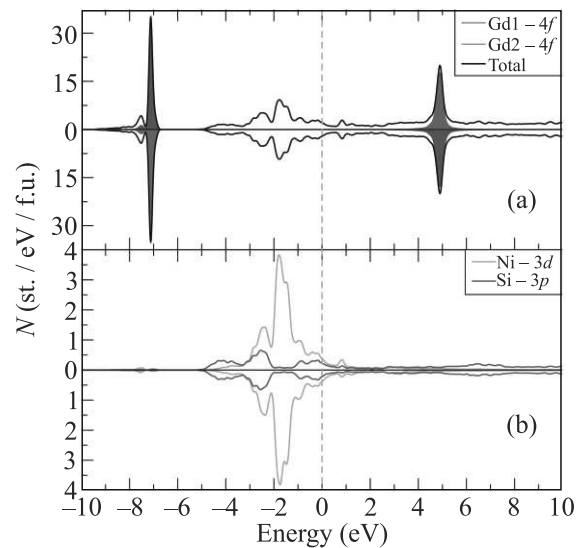


Fig. 1. (Color online) (a) – Total and (b) – partial densities of electronic states of GdNiSi. The Fermi energy is drawn as a vertical dashed orange line at zero energy

Structural data for our calculations were taken from [8]. GdNiSi crystallizes into orthorhombic structure *Pnma*, space group (SG) #62 [8]. The cell volume decreases with the addition of aluminum, except for the high Al content which is most likely due to the presence of another impurity phase [8]. The distances between the nearest gadolinium atoms gradually decrease when modeling an increase in the concentration of aluminum in the system.

In our self-consistent DFT + *U* calculations, the theoretical total magnetic moment of $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ was found to be solely formed by the Gd ion, and Ni, Si, Al are either non-magnetic or have very small magnetic moments. Changing the doping parameters has little effect on the magnetic moments, and the total magnetic moment of all ferromagnetic (FM) compounds does not

¹⁾e-mail: r.d.mukhachev@imp.uran.ru

change. The calculations confirmed that GdNiSi has an AFM state in the Gd sublattice as its ground state. This AFM is more stable in GdNiSi than the FM one with the differences in total energy equal to 1.03 meV/f.u.

Doping of GdNiSi even with small amounts of Al dramatically changes the magnetic ordering type. It was found that, starting with the modelled $\text{GdNiSi}_{0.9}\text{Al}_{0.1}$ compound, the most energy-favorable ordering in the Gd sublattice becomes FM. We checked different types of the AFM orderings of the Gd moments. The energy difference in these cases ranges from 2.32 ($\text{GdNiSi}_{0.7}\text{Al}_{0.3}$) to 4.02 ($\text{GdNiSi}_{0.8}\text{Al}_{0.2}$) meV/f.u. From these results, it is possible to estimate the transition point for the Al concentration x equal to 0.024, i.e. 2.4% Al.

As a result of replacing a small part of silicon atoms with aluminum, there is a decrease in the distances between Gd atoms and the lattice volume as a whole. The decrease of the Gd-Gd distance can be clearly traced for the next-nearest neighbors $d(\text{Gd1-Gd2})_{NNN}$ and $d(\text{Gd1-Gd1})_{NNN}$ for all $x = 0-0.3$ structural data. However, for the nearest neighbors $d(\text{Gd1-Gd2})_{NN}$ and the next-nearest neighbors $d(\text{Gd2-Gd2})_{NNN}$ are decreasing for $x = 0-0.2$, then grows for $x = 0.3$ which we discuss below. The changes of the Gd-Gd distances are accompanied by with exchange coupling changes. As it is well known, the Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida (RKKY) interaction oscillates with the distance [10] and dominates the exchange coupling between the Gd-Gd ions [11]. Then it can govern a transition from AFM to FM ordering for the Al-doped compounds, but the presence of Al is also significant for the AFM formation, as at $x = 0.3$, the FM ordering is preserved despite the increase of some Gd-Gd distances.

From the above theoretical data, an antiferromagnetic-to-ferromagnetic (AFM-FM) transition was found when GdNiSi is doped with Al in our theoretical calculations. The AFM-FM transition takes place in the Gd sublattice, the magnetic moments at the Gd ions remain the same but the type of magnetic ordering changes. It was found that even at concentrations as low as $x = 0.1$, the FM ordering in the Gd sublattice is more favorable in total energy as the ground state which can be ascribed to the shortening of Gd-Gd distances and the oscillating behavior of the RKKY interaction in the Al-doped compositions. The electronic structure demonstrates significant changes in the vicinity of the localized Gd $4f$ states that confirms the presence of the AFM-FM

transition using our theoretical results for Al $x > 0.1$ in good agreement with the previous experimental magnetic results. The concentration-driven magnetic transition is promising for the Gd-based compounds and will motivate further research. Therefore, further study of their properties may be useful for various environmentally sustainable applications.

Funding. This study was supported by the grant of Russian Science Foundation # 24-22-00066, <https://rscf.ru/en/project/24-22-00066/>, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences.

Conflict of interest. The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Antiferromagnetic-to-ferromagnetic transition in the $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ compound”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600757

1. A. G. Kuchin, S. P. Platonov, A. V. Lukoyanov, A. S. Volegov, V. S. Gaviko, R. D. Mukhachev, and M. Yu. Yakovleva, *Intermetallics* **133**, 107183 (2021).
2. H. Zhang, Y. W. Li, E. Liu, Y. J. Ke, J. L. Jin, Y. Long, and B. G. Shen, *Sci. Rep.* **5**, 11929 (2015).
3. S. Gupta, K. G. Suresh, A. V. Lukoyanov, Y. V. Knyazev, and Y. I. Kuz'min, *J. Alloys Compd.* **650**, 542 (2015).
4. E. D. Baglasov and A. V. Lukoyanov, *Symmetry* **11**, 737 (2019).
5. S. P. Platonov, A. G. Kuchin, R. D. Mukhachev, A. V. Lukoyanov, A. S. Volegov, V. S. Gaviko, and M. Yu. Yakovleva, *Intermetallics* **158**, 107894 (2023).
6. Z. J. Mo, J. Shen, L. Q. Yan, C. C. Tang, X. N. He, X. Zheng, J. F. Wu, J. R. Sun, and B. G. Shen, *J. Magn. Magn. Mater.* **354**, 49 (2014).
7. A. G. Kuchin, S. P. Platonov, R. D. Mukhachev, A. V. Lukoyanov, A. S. Volegov, V. S. Gaviko, M. Yu. Yakovleva, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 15508 (2023).
8. G. Yao, G. Zeng, Q. Wang, and W. Cui, *J. Magn. Magn. Mater.* **585**, 170918 (2023).
9. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
10. K. Yano, T. Ohta, and K. Sato, *J. Phys. Chem. Solids* **104**, 13 (2017).
11. C. Y. Lin, J. L. Li, Y. H. Hsieh, K. L. Ou, and B. A. Jones, *Phys. Rev. X* **2**, 021012 (2012).

Impact of domain wall conduction on ferroelectric domain reversal kinetics¹⁾

E. Podivilov⁺, N. Masnev, B. Sturman^{+ 2)}*

⁺*Institute of Automation and Electrometry, Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia*

^{*}*Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia*

Submitted 14 March 2024

Resubmitted 15 April 2024

Accepted 16 April 2024

DOI: 10.31857/S1234567824100100, EDN: VWBMGV

Ferroelectric polarization reversal is a vast developing research area [1]. Reversal of the spontaneous polarization P occurs at electric fields E much smaller than the depolarization field $E_d = 4\pi P/\varepsilon_c$ via nucleation of small critical domains and their subsequent fast-forward and lateral growth. The classical models for the domain formation energy [1–3] deal with the dielectric case (no domain wall (DW) conduction). They lead to non-realistically high energies and are not consistent with the most common law $t_R \propto \exp(E_*/E)$ for the reversal time. The exponential $\exp(-E_l/E)$ Merz law [4] for the lateral expansion with $E_l < E_*$ is proven for many materials including lithium niobate (LN) crystals [1].

Recently, DW conduction was discovered and explored in many materials [5, 6] to become a general ferroelectric effect. It can also be regarded as a general mechanism for the charge compensation during the reversal. The absence of this mechanism would lead to huge depolarizing fields and contradictions within any compensation-free polarization reversal concept. The impact of DW conduction on the polarization reversal remains unexplored. It is indicated, however, that DW conduction substantially modifies the classical expressions for the domain formation energy [7, 8].

We show that account for the DW conduction in LN crystals leads to the exponential $\exp(-E_{n,l}/E)$ field dependences for the rates of domain nucleation (n) and lateral (l) growth with characteristic fields $E_{n,l}$ comparable with E_* and the ratio $E_n/E_l \approx 5$ controlled by the crystal symmetry. Modeling of the reversal kinetics shows distinct stages of nucleation, lateral growth, and coalescence. The field dependence of the reversal

time obeys, in accordance with experiment [9], the law $t_R \propto \exp(E_*/E)$ with $E_* \approx 35$ kV/mm.

An important ingredient of our theory is the assertion that the DW conduction not only lowers the critical domain formation energy W_* , but also provides the necessary E_n/E dependence on the applied electric field. This result was missed in [7, 8]. The corresponding relation for W_* for a semi-spheroidal nucleus is

$$W_* \simeq \pi l_a^{*2} w_1 + \frac{4\pi w_0 l_a^* l_c^*}{3}; \quad l_c^* = \frac{\sqrt{4\pi \Lambda w_0 l_a^*}}{E \sqrt{\varepsilon_a}}, \quad (1)$$

where the critical transverse size $2l_a^*$ is about 1 nm, $\Lambda = \ln(2l_c^* \sqrt{\varepsilon_a}/l_a^* \sqrt{\varepsilon_c})$, $w_{0,1}$ are the surface energies for neutral (0) and maximally charged (1) sections of DW, and $\varepsilon_{a,c}$ are the dielectric constants. This relation provides the inequality $l_c^* \gg l_a^*$ for typical values of E .

Also, we have shown that the presence of DW conduction leaves unchanged the result of [3] about the E_l/E law for the lateral domain expansion in the dielectric case. The characteristic fields E_n and E_l controlling nucleation of domains and their subsequent lateral growth are linked with each other by a simple relation accounting for the point symmetry. For the 3m symmetry of LN crystals $E_n/E_l = 3\sqrt{3}$.

The indicated results enable us to formulate a simple kinetic model of the domain reversal: The input surface area consists of equilateral triangle unit cells with side $a \approx 0.5$ nm. Each cell can be in two states, relevant to non-inverted and inverted domains. An inverted cell cannot flip back. Two probabilities for a cell to flip in a unit time are important. First, it is the probability for an isolated cell to flip ν_n . Second, it is the probability to flip for a close neighbor ν_l , i.e. for a cell having one common length element with already inverted one. Correspondingly, we set

$$\nu_{n,l} = \tau_*^{-1} \exp(-E_{n,l}/E), \quad E < E_l = E_n/3\sqrt{3}, \quad (2)$$

¹⁾Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S002136402460071X and are accessible for authorized users.

²⁾e-mail: sturman@iae.nsk.su

where τ_* can be regarded as a free parameter with values lying in the range $(10^{-1} - 10^{-3})$ s.

Consider some simple features of the reversal kinetics within our model. Let N be the total number of unit cells to flip, $\lg N \gg 1$. The number of nucleated isolated cells grows initially as $N_n = N\nu_n t$. As soon as the rate $3N_n\nu_l$ exceeds $N\nu_n$, the lateral nucleation events become increasingly important. This leads to the formation of domain clusters and, ultimately, to domain coalescence and complete reversal.

We simulated the domain reversal kinetics for $N = 10^6, 10^8$, and 10^{10} . Each iteration $\mu = 1, 2, \dots$ corresponds to a single flip and to a certain time step δt_μ . After each iteration, all cells are divided into four groups, A, B, C, D . The group A consists of inverted cells. The group B includes non-inverted cells possessing one common length element with the inverted ones. The group C consists of non-inverted cells possessing 2 and 3 common elements with the inverted ones. The group D consists of the non-inverted cells. The cells are renumbered in each group after each iteration.

Consider an arbitrary iteration. The time step is here $\delta t_\mu = (\nu_n N_D + \nu_l N_B)^{-1}$. Next, we introduce two probabilities $p_n = \nu_n N_D \delta t_\mu$ and $p_l = \nu_l N_B \delta t_\mu$ such that $p_n + p_l = 1$. After that, we choose randomly between p_n and p_l . With the actual process determined, we choose randomly one of the cells within the actual group.

Computer simulations were performed for $E_n = 75$, $E_l = E_n/3\sqrt{3} \simeq 14.5$ kV/mm, and $\tau_* = 0.01$ s within the range $E = (3 - 12)$ kV/mm.

Sub-figures 1a, b, c show representative domain patterns at different stages of domain reversal for $N = 10^8$ and $E = 4$ kV/cm. At 19 s we are within the stage of lateral growth. The predominating shapes of domains are close to circles. At 33 s, when about 40 % of cells are inverted, we see a broad distribution of domain forms and sizes; this is a developed coalescence stage. At $t = 50$ s, when about 90 % of cells are inverted, we can see only rare peculiar islands of non-inverted domains.

One of the most important results is the field dependence of the reversal time t_R . With a good accuracy, it follows the law $t_R = (\nu_n \nu_l^2)^{-1/3} = \tau_* \exp(E_*/E)$ with $E_* = (E_n + 2E_l)/3 \simeq 34.4$ kV/cm. This is in a nice agreement with experiment [9]. Among other findings is a scaling invariance of the dependence $N_A(t)$ for different fields and the influence of E on the fractions of domains inverted via primary nucleations and the lateral expansion.

In conclusion, it is shown that conduction of DWs in LN crystals leads to strong consequences for the field in-

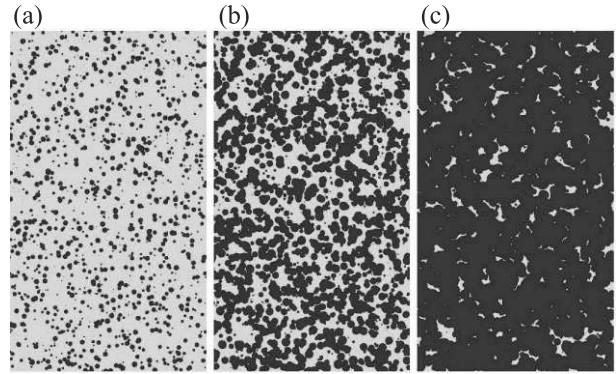


Fig. 1. (Color online) Domain patterns for $N = 10^8$ and $E = 4$ kV/mm. The cases (a), (b), (c) correspond to $t = 19, 33, 50$ s. Blue and yellow areas refer to inverted and non-inverted domains. The horizontal size is $10^4 a$

duced domain reversal: The activation energy for nucleation lowers, and the reversal kinetic represents nucleation of needle-like domains and their subsequent lateral growth resulting in the law $\exp(E_*/E)$ for the reversal time. The kinetic processes running at different fields are self-similar.

Funding. N. Masnev was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state assignment # FFWR-2024-0014).

Conflict of interest. The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Impact of Domain Wall Conduction on Ferroelectric Domain Reversal Kinetics.” Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S002136402460071X

1. A. K. Tagantsev, L. E. Cross, and J. Fousek, *Domains in Ferroic Crystals and Thin Films*, Springer, N.Y. (2010).
2. R. Landauer, J. Appl. Phys. **28**, 227 (1957).
3. R. C. Miller, and G. Weinreich, Phys. Rev. **117**, 1460 (1960).
4. W. J. Merz, Phys. Rev. **95**, 690 (1954).
5. R. K. Vasudevan, W. Wu, J. R. Guest, A. P. Baddorf, A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, N. Balke, V. Nagarajan, P. Maksymovych, and S. V. Kalinin, Adv. Funct. Mater. **23**, 2592 (2013).
6. P. S. Bednyakov, B. I. Sturman, T. Sluka, A. K. Tagantsev, and P. V. Yudin, NPJ Comput. Mater. **4**, 65 (2018).
7. B. Sturman and E. Podivilov, JETP Lett. **116**, 246 (2022).
8. B. Sturman and E. Podivilov, Ferroelectrics **601**, 80 (2023).
9. A. Kuroda, S. Kurimura, and Y. Uesu, Appl. Phys. Lett. **69**, 1565 (1996).

Высокочастотный эффект Холла и поперечно-электрические гальваномангнитные волны в двумерных электронных системах с постоянным током¹⁾

А. С. Петров²⁾, Д. А. Свинцов

Московский физико-технический институт, лаборатория оптоэлектроники двумерных материалов,
141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 4 марта 2024 г.

После переработки 19 апреля 2024 г.

Принята к публикации 20 апреля 2024 г.

Получен тензор электродинамической проводимости для двумерной электронной системы с дрейфом на постоянном токе с учетом высокочастотного эффекта Холла (взаимодействия постоянного тока с переменным магнитным полем). Мы демонстрируем ограничения квазистатического подхода, пренебрегающего этим эффектом. С помощью электродинамической проводимости мы обнаруживаем новую двумерную поперечную электрическую (ТЕ) электромагнитную моду. Эта мода является невязанной с дисперсией $\omega = \mathbf{k}\mathbf{u}_0$ и проявляется в понижении коэффициента отражения ДЭС на резонансной частоте. Кроме того, мы предсказываем двулучепреломление падающей затухающей ТЕ-волны в системе двумерной электронной системы с дрейфом и обнаруживаем намеки на черенковское усиление в низкочастотном пределе. Также обсуждаются предельные случаи, когда квазистатический подход уместен.

DOI: 10.31857/S1234567824100112, EDN: VMJWIY

Электромагнитные (ЭМ) волны в изотропных диэлектриках поперечны. Если мы введем проводящую среду (плазму) в диэлектрическую среду, ЭМ волны станут более сложными и могут быть описаны как суперпозиция ТМ (поперечных магнитных) и ТЕ (поперечных электрических) мод. Первые широко известны как плазменные волны, или плазмоны, поскольку они включают в себя не только колебания ЭМ полей, но и колебания плотности электрического заряда и тока в проводящих средах. В свою очередь, ТЕ-волны обычно включают в себя только колебания тока, а не плотности заряда³⁾.

В объемной изотропной плазме ни ТМ-, ни ТЕ-моды не могут распространяться на частотах ω ниже плазменной частоты ω_{3d} даже в отсутствие диссипации. В то же время в анизотропных средах это условие сильно ослабляется. Например, объемная плазма в магнитном поле поддерживает геликоны [1, 2], низкочастотные ТЕ-моды с высокой добротностью ($\omega\tau \ll 1$, где τ – эффективное время релаксации импульса носителя заряда). Геликоны впервые наблюдались в натрии [3], а год спустя были связаны

со свистящими атмосфериками [4], ~ 10 кГц колебаниями, которые распространяются вдоль магнитного поля Земли и могут обогнуть Землю несколько раз прежде, чем исчезнуть.

Хотя приложение внешнего магнитного поля является наиболее простым способом введения ТЕ-мод в плазму, оно может быть не самым эффективным. Менее распространенные варианты включают пропускание через образец постоянного электрического тока, что приводит к образованию гальваномангнитных волн (ГМВ) сверхнизкой частоты. Эти волны были предсказаны Морозовым и Шубиным в 1964 году [5] и наблюдались Копыловым в 1979 г. [6] в монокристаллах Вi. Термин *магнитный* в ГМВ отражает магнитную природу возвращающей силы в этой волне. Спектр ГМВ задается простым соотношением [6]

$$\omega = \mathbf{k}\mathbf{u}_0 - ic^2k^2/4\pi\sigma_v, \quad (1)$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор, $\mathbf{u}_0$ – постоянная скорость дрейфа, c – скорость света, σ_v – статическая (объемная) проводимость Друде. Подставляя типичные параметры для кристалла висмута в (1), получаем $\nu = \text{Re } \omega \simeq 600$ рад/с; $\text{Im } \omega \simeq -100$ рад/с, тогда как $1/\tau \simeq 1$ ТГц. В дополнение к этому довольно необычному поведению, ГМВ обладают встроенной невязанностью: уравнение (1) обязывает волновой вектор иметь положительную проекцию на скорость

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: petrov.as@mipt.ru

³⁾Это утверждение легко проверяется на основании уравнения непрерывности $i\omega\rho = (i\mathbf{k}, \hat{\sigma}\mathbf{E})$. Обычно тензор проводимости диагонален и для ТЕ мод имеем $\rho = 0$.

дрейфа, что подтверждается экспериментом [6]. К слову, похожие свойства проявляют и термомагнитные волны, распространяющиеся вдоль градиента температуры в объемных полупроводниках [7, 8], однако обсуждение этих мод выходит за рамки настоящей работы.

Два приведенных примера (геликоны и ГМВ) убеждают нас в том, что большие длины распространения при низких $\omega\tau$ -факторах представляют собой естественную особенность ТЕ-мод. Это происходит из-за того, что ток и электрическое поле ТЕ-волн сдвинуты по фазе на $\pi/2$, причем сдвиг не зависит от $\text{Re } \sigma^4$. Таким образом, ТЕ электромагнитные волны в объемной плазме представляют собой уникальные объекты с многообещающими применениями из-за больших длин распространения.

Несмотря на яркие свойства в объемной плазме, ТЕ-моды практически не исследованы в двумерных электронных системах (ДЭС). Причиной этого может быть тот факт, что обычные ДЭС (с параболической дисперсией электронов) не могут поддерживать ТЕ-моды. Действительно, Фалько и Хмельницкий показали [9], что ТЕ-мода может распространяться вдоль ДЭС только в том случае, если поверхностная проводимость ДЭС σ имеет емкостную природу, т.е.

$$\text{Im } \sigma(\omega) < 0, \quad (2)$$

временная зависимость $e^{-i\omega t}$ предполагается на протяжении всей статьи. Лишь недавно, в 2007 г., С. А. Михайлов и К. Циглер отметили [10], что электрон-дырочная плазма в графене может быть использована, чтобы удовлетворить это, казалось бы, невыполнимое условие и таким образом дать шанс для наблюдения ТЕ волн. И эта мода действительно была обнаружена в графене несколько лет спустя [11]. Дальнейшие работы были посвящены изучению ТЕ волн в графене при наличии постоянного тока, перпендикулярного волновому вектору [12, 13].

В то же время, ТЕ волны в анизотропных ДЭС с параболическим спектром изучены слабо. Так, нам известны лишь намеки на существование поперечных магнитозвуковых волн в вязких двумерных электронных жидкостях [14–16].

В этой статье мы показываем, что взаимодействие постоянного дрейфа носителей заряда в ДЭС с магнитным полем ТЕ-волны (которое можно назвать высокочастотным эффектом Холла) оказывает

заметное влияние на высокочастотную проводимость и электромагнитные свойства 2DES. Мы выводим соответствующий *электродинамический* тензор проводимости и прогнозируем образование двумерных ГМВ, аналогичных (1). Мы устанавливаем распределение поля в этих модах и исследуем отклик ДЭС на возбуждающее излучение с учетом этого взаимодействия. Кроме того, мы показываем, что этот эффект ответственен за двойное лучепреломление эванесцентной ТЕ-волны, падающей на ДЭС, и обнаруживаем намеки на черенковское усиление в пределе низких частот.

1. Теоретическая модель. Мы рассматриваем бесконечную ДЭС с однородной плотностью носителей заряда n_0 , зажатую между двух материалов с диэлектрической и магнитной проницаемостями ϵ_i и $\mu_i, i = 1, 2$. Постоянный ток $j_0 = n_0 u_0$ направлен вдоль оси Ox (рис. 1).

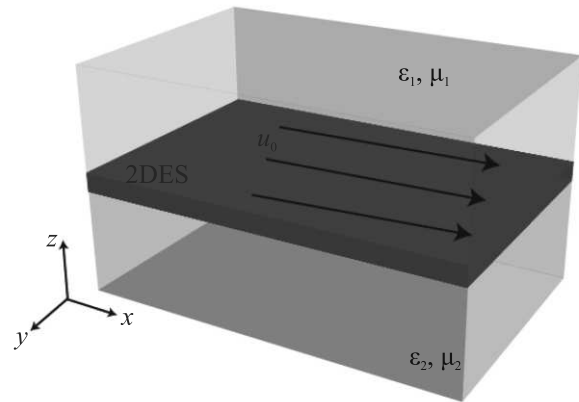


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение системы, в которой существует двумерная ГМВ. ДЭС с однородной плотностью носителей заряда помещена в однородное электрическое поле, направленное вдоль оси x , что приводит к возникновению постоянного тока с дрейфовой скоростью u_0 . ДЭС помещена между диэлектриков с проницаемостями ϵ_1, ϵ_2 и μ_1, μ_2 . Для простоты в большей части работы полагается $\epsilon_1 = \epsilon_2, \mu_1 = \mu_2 = 1$

1.1. Электродинамическая проводимость ДЭС при наличии дрейфа. Общим свойством любой системы, которое определяет ее отклик на внешние электромагнитные поля и, таким образом, несет информацию о собственных модах системы, является диэлектрическая функция или, что то же самое, проводимость. Проводимость рассматриваемой системы выведем из линеаризованного уравнения Эйлера

$$-i\tilde{\omega} m \mathbf{v}_\omega = \mathbf{F}_L + m(\mathbf{u}_0, \nabla) \mathbf{v}_\omega, \quad (3)$$

где $\mathbf{F}_L$ – сила Лоренца, m – эффективная масса электрона, $\tilde{\omega} = \omega + i/\tau_p, 1/\tau_p$ – эффективное время ре-

⁴)Этот факт можно доказать, комбинируя закон электромагнитной индукции и закон Ампера: $q^2 \mathbf{E} = 4\pi i \omega / c^2 \mathbf{j}$ для ТЕ волн.

лаксации импульса носителя заряда по отношению к столкновениям с примесями и фононами и $\mathbf{v}_\omega$ – временная Фурье-компонента скорости в волне. Обычно в отсутствие внешнего магнитного поля на носители заряда действует только электрическая составляющая силы Лоренца. Однако при наличии фонового дрейфа существенна и магнитная составляющая; в частности, эта составляющая приводит к образованию электромагнитных (непотенциальных) плазменных неустойчивостей в газовой плазме [17] или полупроводниках [18]. Имея это в виду, мы перепишем уравнение (3) следующим образом:

$$-i\tilde{\omega}m\mathbf{v}_\omega = -e\mathbf{E}_\omega - \frac{e}{c}\mathbf{u}_0 \times \mathbf{B}_\omega + m(\mathbf{u}_0, \nabla)\mathbf{v}_\omega, \quad (4)$$

где $\mathbf{E}_\omega$ и $\mathbf{B}_\omega$ – временные Фурье компоненты электрического и магнитного полей волны, соответственно.

Далее мы проделываем следующие операции: (1) применяем закон Фарадея и выражаем $\mathbf{B}_\omega$ через $\mathbf{E}_\omega$, (2) проводим двумерное преобразование Фурье в плоскости ДЭС и (3) выражаем плотность тока в волне $\mathbf{j} = n_0\mathbf{v} + \mathbf{u}_0n$ ($\mathbf{v}$ и n – это возмущения скорости и плотности носителей заряда в волне) через электрическое поле:

$$\mathbf{j} = \hat{\sigma}^{ED}\mathbf{E}, \quad (5)$$

где все величины, ассоциированные с волной, подразумеваются их $(\mathbf{k}, \omega)$ -компонентами Фурье, $\mathbf{k}$ – волновой вектор в плоскости ДЭС, и электродинамический тензор проводимости $\hat{\sigma}^{ED}$ дается выражением

$$\hat{\sigma}^{ED} = \frac{\sigma_0}{\tilde{\omega} - k_x u_0} \begin{pmatrix} \frac{\omega^2 + (k_y u_0)^2}{(\omega - k_x u_0)} & k_y u_0 \\ k_y u_0 & \omega - k_x u_0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где $\sigma_0 = ie^2 n_0 / m\omega$ – динамическая проводимость свободной ДЭС. Поучительно будет сравнить $\hat{\sigma}^{ED}$ с квазистатическим тензором проводимости $\hat{\sigma}^{QS}$ (когда высокочастотный эффект Холла не принимается во внимание):

$$\hat{\sigma}^{QS} = \frac{\sigma_0}{\tilde{\omega} - k_x u_0} \begin{pmatrix} \frac{\omega^2}{(\omega - k_x u_0)} & \frac{\omega k_y u_0}{(\omega - k_x u_0)} \\ 0 & \omega \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Приведенный выше тензор несимметричен, что означает киральность такой системы (см. дополнительные материалы). Конечно, постоянный ток не может привести киральность, поэтому квазистатическое приближение (7) следует использовать осторожно. Тем не менее, это приближение работает хорошо, пока

$$\mathbf{j}_\omega^{ED} - \mathbf{j}_\omega^{QS} \propto \frac{u_0}{c}\mathbf{B}_\omega \rightarrow 0. \quad (8)$$

Таким образом, все предыдущие результаты, полученные для ТМ плазмонов ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{E}_\omega$, $\mathbf{B}_\omega = 0$) в ДЭС с дрейфом (например, [19–24]) остаются верными, равно как и некоторые строгие электродинамические модели, построенные для специальных конфигураций волновых векторов, дрейфа и поля волны; к примеру, $E_y = 0$ в [25].

1.2. Поиск собственных мод. В этом разделе нашей целью будет отыскание собственных мод структуры, изображенной на рис. 1 с проводимостью ДЭС $\hat{\sigma}^{ED}$. Для этого мы полагаем, что ДЭС расположена в плоскости $z = 0$, обозначаем верхнее полупространство $z > 0$ символом I и нижнее полупространство $z < 0$ символом II, и ищем собственные моды в виде линейной комбинации ТЕ и ТМ волн:

$$\mathbf{E}_I = \left[\text{TE}_I \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ \cos \alpha \\ 0 \end{pmatrix} + \text{TM}_I \begin{pmatrix} -ik_z \cos \alpha / k \\ -ik_z \sin \alpha / k \\ 1 \end{pmatrix} \right] \mathcal{E}_I(\mathbf{r}, t); \quad (9)$$

$$\mathbf{E}_{II} = \left[\text{TE}_{II} \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ \cos \alpha \\ 0 \end{pmatrix} + \text{TM}_{II} \begin{pmatrix} ik_z \cos \alpha / k \\ ik_z \sin \alpha / k \\ 1 \end{pmatrix} \right] \mathcal{E}_{II}(\mathbf{r}, t), \quad (10)$$

где $\text{TE}_{I,II}$ и $\text{TM}_{I,II}$ – амплитуды электрического поля ТЕ и ТМ волн в соответствующих областях,

$$\mathcal{E}_{I,II}(\mathbf{r}, t) = \exp(ik \cos \alpha x + ik \sin \alpha y \mp k_z z - i\omega t), \quad (11)$$

α – угол между волновым вектором и вектором скорости дрейфа, $k_z = \sqrt{k^2 - k_0^2}$, и $k_0 = \sqrt{\epsilon\omega/c}$.

Затем мы вычисляем соответствующие магнитные поля с помощью закона Фарадея и применяем граничные условия к тангенциальным компонентам электрического и магнитного полей. В результате мы приходим к линейной системе, которая приобретает диагональный вид, если заменить переменные на $\text{TE}_\pm = 1/2(\text{TE}_I \pm \text{TE}_{II})$ и $\text{TM}_\pm = 1/2(\text{TM}_I \pm \text{TM}_{II})$:

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_1 & 0 \\ 0 & \hat{M}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{\text{TE}_-, \text{TM}_+\}^T \\ \{\text{TE}_+, \text{TM}_-\}^T \end{pmatrix} = 0, \quad (12)$$

где верхний индекс T обозначает транспонирование,

$$\hat{M}_1 = \begin{pmatrix} -\sin \alpha & -i\kappa_z \cos \alpha / \kappa \\ \cos \alpha & -i\kappa_z \sin \alpha / \kappa \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$\kappa_z = k_z / k_0, \quad \kappa = k / k_0,$$

$$\hat{M}_2 = \begin{pmatrix} -i \sin \alpha \Sigma_{xx} + i \cos \alpha \Sigma_{xy} + \kappa_z \sin \alpha & \cos \alpha \Sigma_{xx} \kappa_z / \kappa + \sin \alpha \Sigma_{xy} \kappa_z / \kappa - i \cos \alpha / \kappa \\ -i \sin \alpha \Sigma_{yx} + i \cos \alpha \Sigma_{yy} - \kappa_z \cos \alpha & \cos \alpha \Sigma_{yx} \kappa_z / \kappa + \sin \alpha \Sigma_{yy} \kappa_z / \kappa - i \sin \alpha / \kappa \end{pmatrix}, \quad (14)$$

и $\Sigma_{ij} = 2\pi\sigma_{ij}/c$.

Легко проверить, что $\det \hat{M}_1 = 0$ тогда и только тогда, когда $k_z = 0$, что соответствует расходимости волн при $z = \pm\infty$. Поэтому мы заключаем, что $\text{TE}_- = \text{TM}_+ = 0$, или $\text{TE}_I = \text{TE}_{II} = \text{TE}$, $\text{TM}_I = -\text{TM}_{II} = \text{TM}$, и приходим к

$$\hat{M}_2 \begin{pmatrix} \text{TE} \\ \text{TM} \end{pmatrix} = 0. \quad (15)$$

Таким образом, дисперсионное уравнение имеет вид

$$\det \hat{M}_2 = 0. \quad (16)$$

Для начала рассмотрим простой случай $\alpha = 0$ (волновой вектор волны сонаправлен с дрейфом). Тогда $\Sigma_{xy} = \Sigma_{yx} = 0$ и уравнение (16) упрощается до

$$\begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{xx}\kappa_z - i \\ i\Sigma_{yy} - \kappa_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{TE} \\ \text{TM} \end{pmatrix} = 0, \quad (17)$$

Система выше имеет нетривиальные решения, если

$$\Sigma_{xx}\kappa_z - i = 0, \quad \text{TE} = 0 \quad (\text{TM волна}), \quad (18)$$

что соответствует

$$i\Sigma_{yy} - \kappa_z = 0, \quad \text{TM} = 0 \quad (\text{TE волна}). \quad (19)$$

Первое из уравнений выше определяет обычный ТМ плазмон с частотой, сдвинутой из-за эффекта Доплера

$$(\omega - ku_0)(\tilde{\omega} - ku_0) = \omega_{2d}^2/\varepsilon, \quad (20)$$

где $\omega_{2d}^2 = 2\pi e^2 n_0 |k_z|/m$ – фундаментальная 2D плазменная частота, которую мы полагаем независимой от ε по определению.

В свою очередь, уравнение (19) соответствует двумерной ТЕ гальваномагнитной волне с дисперсией

$$\omega_{TE} = \mathbf{k}\mathbf{u}_0 - \frac{i}{\tau_p} \frac{1}{1 + A^2}, \quad (21)$$

где $A = \omega_{2d}/|k_z|c$ – фактор запаздывания [26–28]. Заметим, что $\text{Im} \sigma_{xx}(\omega_{TE}) > 0$ одновременно с $\text{Im} \sigma_{yy}(\omega_{TE}) < 0$, что не противоречит условию Фалько и Хмельницкого (2), выведенного для изотропных ДЭС.

Мы видим, что уравнения (1) и (21) имеют много общего. Действительно, 3D дисперсия (1) была выведена для статической проводимости, и учет ее динамической части привел бы к аналогу уравнения (21) с единственным отличием $\omega_{2d} \rightarrow \omega_{3d} = \sqrt{4\pi e^2 n_{3d}/m}$, n_{3d} – 3D плотностью носителей заряда.

Что касается случая $\alpha \neq 0$, та же дисперсия (21) справедлива в наиболее практичном пределе $u_0/c \ll 1, kc \gg \omega, \omega_{2d}$ (см. дополнительные материалы, раздел II). В качестве иллюстрации мы приводим численное решение уравнения (16) для ДЭС в гетероструктуре GaAs/AlGaAs на рис. 2 с параметрами расчета, указанными в подписи к рисунку. В этом случае профили мод будут ТЕ, ТМ-смешаны.

Основное отличие между 2D и 3D ГМВ является количественным, что проиллюстрировано на рис. 3. Из этого рисунка, синяя ось, мы видим, что ГМВ становятся слабозатухающими в длинноволновом пределе, и в этом пределе декремент затухания 3D ГМВ примерно в $n_{3d}/n_{2d} = 10^6$ раз ниже декремента 2D ГМВ.

В то же время, даже в длинноволновом пределе (см. рис. 3) добротность 2D ГМВ крайне мала из-за идентичных зависимостей мнимой и действительной частей частоты от волнового вектора: $\text{Re} \omega \propto k$ и $\text{Im} \omega \propto A^{-2} \propto k$, где последнее соотношение является следствием корневой зависимости спектра фундаментальной моды 2D плазменных волн. Это маленькое значение может быть увеличено с помощью увеличения дрейфа (что увеличит $\text{Re} \omega$) или увеличения концентрации носителей заряда (что уменьшит $\text{Im} \omega$), однако даже при экстремальных значениях добротность будет порядка 10^{-3} . Более изощренным способом уменьшить потери 2D ГМВ может стать введение магнитного окружения [29–31], что было недоступно для 2D ГМВ. Наши оценки показывают, что магнитная среда снижает коэффициент потерь в квадратный корень из магнитной проницаемости раз, что может увеличить добротность максимум на порядок. Дальнейшие исследования влияния магнитного окружения на 2D ГМВ будут изложены в последующих работах.

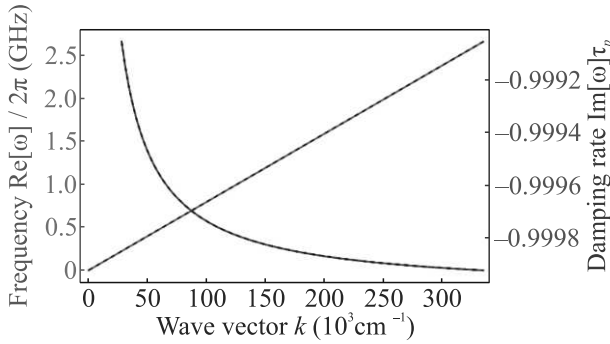


Рис. 2. (Цветной онлайн) Численное решение (сплошная линия) уравнения (16) и теоретические кривые (21) для ДЭС в гетероструктуре GaAs/AlGaAs с параметрами $m^* = 0.067m_e$, m_e – масса свободного электрона, $\epsilon = 1$ для простоты, $n_0 = 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $u_0 = 10^5 \text{ см/с}$, $\alpha = \pi/3$, $\tau_p = 1 \text{ пс}$

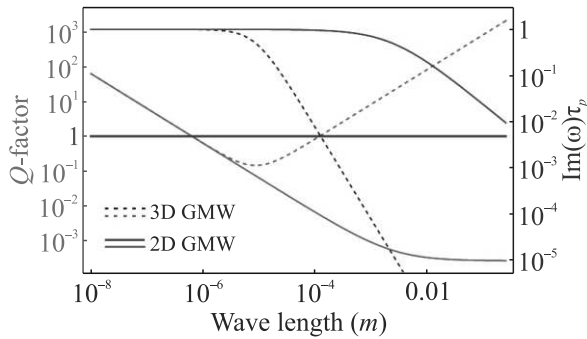


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сравнение добротностей и темпов затухания 2D и 3D ГМВ. Зеленые линии соответствуют зеленой оси, синие линии – синей оси. Референсная пурпурная линия $Q = 1$ соответствует зеленой оси. Числовые параметры ДЭС такие же, что и в рис. 2 за исключением скорости дрейфа, которая здесь взята равной 10^7 см/с (примерно скорость насыщения в GaAs) и $\alpha = 0$

1.3. *Взаимодействие ДЭС с дрейфом с ЭМ излучением.* Обнаруженная ТЕ ГМВ обладает общей чертой всех ТЕ волн: она уменьшает коэффициент отражения падающих волн [2, 11]. В качестве примера мы рассматриваем эванесцентную волну $\mathbf{E}_{ev} = E_0 \mathbf{e}_y e^{-i\omega t + ik_x x + k_z z}$, которая падает на систему из рис. 1. Эванесцентная волна может быть получена, например, в конфигурации Отто (как это было сделано в работе [11]). В результате появляются отраженная и прошедшая волны:

$$\mathbf{E}_{r,t} = \{r, t\} E_0 \mathbf{e}_y e^{-i\omega t + ik_x x \mp k_z z}. \quad (22)$$

Граничные условия на ДЭС записываются так:

$$1 + r = t; \quad (23)$$

$$-1 + r + t = \frac{2i\omega}{k_z c} \frac{2\pi\sigma_{yy}}{c} t, \quad (24)$$

откуда мы находим коэффициент отражения:

$$r = \frac{A^2}{A^2 + \frac{\tilde{\omega} - \mathbf{k}\mathbf{u}_0}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{u}_0}}. \quad (25)$$

Мы видим, что при $\omega = \mathbf{k}\mathbf{u}_0$ коэффициент отражения обращается в нуль (а коэффициент прохождения равен единице). Это означает, что при выполнении “условия резонанса” $\omega = \mathbf{k}\mathbf{u}_0$ падающая волна не чувствует 2D систему и свободно проходит через нее, в отличие от обычных плазмонов. Однако в реальных экспериментах коэффициент отражения не будет точно равен нулю при “ТЕ-резонансе”, поскольку всегда существует контраст диэлектрических проницаемостей $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$.

Мы также решили задачу, когда волновой вектор падающей ТЕ-волны в плоскости не параллелен дрейфу: $\mathbf{k} = \mathbf{e}_x k \cos \alpha + \mathbf{e}_y k \sin \alpha$. В этом случае падающая волна испытывает двулучепреломление и в сигналах отражения и прохождения помимо волны ТЕ-поляризации появляется волна ТМ-поляризации (10). Соответствующие коэффициенты прохождения и отражения ($r_{TE, TM}$ и $t_{TE, TM}$ соответственно) находятся обычным образом из уравнений Максвелла.

На рисунке 4 мы строим нормированный коэффициент отражения $|r_{TE}^{ED}|$ ТЕ волны (т.е., $\mathbf{E}_{ev} \propto \mathbf{e}_x(-\sin \alpha) + \mathbf{e}_y \cos \alpha$), падающей на ДЭС. $|r_{TE}^{ED}|$ нормирован на $|r_{TE}^{QS}|$, где верхний индекс обозначает модель проводимости, взятую для расчета. Из рисунка 4 мы видим ту же линию “ТЕ резонанса” $\omega = \mathbf{k}\mathbf{u}_0$, соответствующую условию $r_{TE}^{ED} = 0$, как и в случае нормального падения $\alpha = 0$, формула (25). Очевидно, что квазистатическая модель не воспроизводит этот результат. Быстрый рост $|r_{TE}^{ED}|/|r_{TE}^{QS}|$ в нижней части графика связан с нефизической зависимостью $r_{TE}^{QS} \propto \omega$ для низких частот. Отметим, что коэффициенты отражения существенно различаются по величине.

Интересно, что даже в квазистатическом пределе, родине проводимости $\hat{\sigma}^{QS}$, тензор квазистатической проводимости может приводить к ошибочным результатам. Так, мы обнаружили поразительное различие между r_{TM}^{QS} и r_{TM}^{ED} в пределе $kc \gg \omega$:

$$r_{TM}^{QS} \equiv 0; \quad (26)$$

$$r_{TM}^{ED} \propto i|\mathbf{k} \times \mathbf{u}_0|/\omega = iku_0 \sin \alpha/\omega. \quad (27)$$

Из этих уравнений мы заключаем, что электродинамический подход предсказывает двулучепреломление падающей ТЕ-волны, тогда как квазистатический подход игнорирует этот эффект. Кроме того, мы наблюдаем, что r_{TM}^{ED} возрастает как $1/\omega$, что

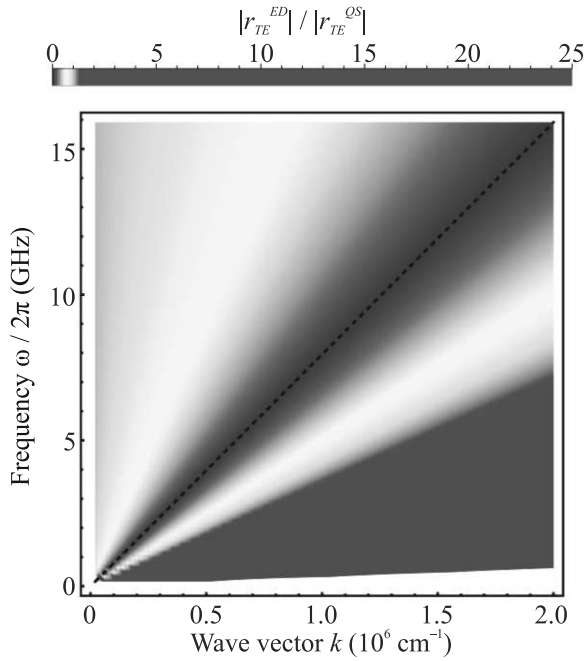


Рис. 4. (Цветной онлайн) Нормированный коэффициент отражения $|r_{TE}^{ED}|$ ТЕ волны, падающей на ДЭС, полученный на основе электродинамической (6) проводимости. Черная штриховая линия соответствует действительной части дисперсии (21). Параметры расчета такие же, что и на рис. 2. Значения нормированы на $|r_{TE}^{QS}|$, т.е. коэффициент отражения ТЕ волны в той же конфигурации, но рассчитанный с помощью квазистатической проводимости; $|r_{TE}^{QS}|$ – это гладкая функция в приведенной области значений ω, k

можно объяснить черенковским усилением падающей волны в низкочастотном пределе $\omega < ku_0$. Подробное обсуждение этого эффекта выходит за рамки настоящей работы и будет представлено в другом месте.

2. Общие замечания и заключения. Наше описание основано на гидродинамическом уравнении (3). Это приближение имеет долгую историю [32] и формально применимо, когда частота электрон-электронных столкновений $\nu_{ee} \gg \omega/2\pi, 1/\tau_p$. Примечательно, что ν_{ee} может достигать значений порядка ТГц [33], что оправдывает применение гидродинамической модели в этом диапазоне частот и для относительно чистых образцов ($\tau_p \geq 1$ пс). Однако применимость гидродинамического подхода еще шире, поскольку он соответствует сохранению только нулевой и первой угловых гармоник импульса функции распределения. Это приближение становится асимптотически точным в длинноволновом пределе $kv_F/|\omega + i\nu_{ee}| \ll 1$, где v_F – скорость Ферми.

Большинство наших оценок соответствовало дрейфовой скорости $u_0 = 10^3$ м/с в гетероструктурах GaAs/AlGaAs. Для типичного порядка подвижности $\mu = 10^4$ м²/В·с [34] и характерного размера образца $L = 100$ мкм это значение соответствует $u_0 L/\mu = 10$ мВ напряжения между истоком и стоком.

В работе мы исследовали взаимодействие постоянного дрейфа носителей заряда с переменным магнитным полем в ДЭС (высокочастотный эффект Холла) и получили ранее неизвестный тензор электродинамической проводимости $\hat{\sigma}^{ED}$ (6). Этот тензор симметричен, в отличие от асимметричного тензора квазистатической проводимости, который предполагает нефизическую киральность. Помимо этого недостатка, квазистатическая модель не может предсказать двулучепреломление падающей ТЕ-волны на ДЭС даже в квазистатическом пределе $\omega \ll kc$, а также черенковское усиление; все эти эффекты можно описать только с помощью $\hat{\sigma}^{ED}$.

Кроме того, мы показали, что высокочастотный эффект Холла приводит к образованию новой электромагнитной моды – двумерной ТЕ гальваномагнитной волны (ГМВ). Эта волна существует вблизи ДЭС с постоянным током и имеет линейную дисперсию (21). Темп ее затухания зависит от длины волны и может стать меньше стандартного темпа затухания $1/2\tau_p$ 2D фундаментального плазмона в пределе длинных волн. Однако добротность в этом пределе угасает с той же скоростью, что ставит открытым вопрос о надлежащем выборе окружения ДЭС (например, магнитного), позволяющего снизить потери. В отличие от 2D ТМ-плазмонов, 2D ТЕ ГМВ проявляется в *понижении* коэффициента отражения падающей ЭМ волны.

Хотя квазистатическая проводимость может быть использована для описания ТМ плазменных волн, хотелось бы указать на неуместность этого действия, поскольку математические выражения для $\hat{\sigma}^{QS}$ и $\hat{\sigma}^{ED}$ имеют сопоставимую сложность.

Мы полагаем, что полученные результаты существенно дополняют наши представления об электромагнитных свойствах ДЭС в присутствии постоянного тока.

Авторы благодарят В. Муравьева за предоставление ссылок [6, 8], которые и послужили отправной точкой для данной работы. АСП также благодарит Г. Алымова, И. Моисеенко и Д. Аверьянова за плодотворные беседы.

Финансирование работы. Работы поддержаны грантом Российского научного фонда, проект # 23-72-01013.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. O.V. Konstantinov and V.I. Perel, ZhETF **38**, 161 (1960).
2. B.W. Maxfield, Am. J. Phys. **37**(3), 241 (1969).
3. R. Bowers, C. Legendy, and F. Rose, Phys. Rev. Lett. **7**(9), 339 (1961).
4. R. A. Helliwell and M. G. Morgan, Proceedings of the IRE **47**(2), 200 (1959).
5. A. I. Morozov and P. Shubin, Sov. Phys. JETP **19**, 484 (1964).
6. V. N. Kopylov, JETP Lett. **29**(1), 23 (1979).
7. L. E. Gurevich and B. L. Gelmont, ZhETF **46**, 884 (1964).
8. V. N. Kopylov, JETP Lett. **28**(3), 121 (1978).
9. V. I. Falko and D. E. Khmel'nitskii, ZhETF **95**, 847 (1989).
10. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, Phys. Rev. Lett. **99**(1), 016803 (2007).
11. S. G. Menabde, D. R. Mason, E. E. Kornev, C. Lee, and N. Park, Sci. Rep. **6**(1), 21523 (2016).
12. I. M. Moiseenko, V. V. Popov, and D. V. Fateev, J. Phys. Condens. Matter **34**(29), 295301 (2022).
13. I. M. Moiseenko, V. V. Popov, and D. V. Fateev, J. Phys. Condens. Matter **35**(25), 255301 (2023).
14. P. S. Alekseev and A. P. Alekseeva, Phys. Rev. Lett. **123**(23), 236801 (2019).
15. D. A. Bandurin, E. Mönah, K. Kapralov, I. Y. Phinney, K. Lindner, S. Liu, J. H. Edgar, I. A. Dmitriev, P. Jarillo-Herrero, D. Svintsov, and S. D. Ganichev, Nat. Phys. **18**(4), 462 (2022).
16. K. Kapralov and D. Svintsov, Phys. Rev. B **106**(11), 115415 (2022).
17. A. B. Mikhailovskii, *Electromagnetic instabilities in an inhomogeneous plasma*, IOP Publishing Bristol, Philadelphia and N.Y. (1992).
18. J. Pozhela, *Plasma and Current Instabilities in Semiconductors: International Series on the Science of the Solid State*, Pergamon Press, Oxford, N.Y., Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt (1981), v. 18.
19. M. Dyakonov and M. Shur, IEEE Trans. Electron Devices **43**(3), 380 (1996).
20. V. Yu. Kachorovskii and M. S. Shur, Solid-State Electronics **52**(2), 182 (2008).
21. M. I. Dyakonov, Semiconductors **42**, 984 (2008).
22. O. Sydoruk, R. R. A. Syms, and L. Solymar, Appl. Phys. Lett. **97**(26), 263504 (2010).
23. A. S. Petrov and D. Svintsov, Phys. Rev. B **99**(19), 195437 (2019).
24. A. S. Petrov and D. Svintsov, Phys. Rev. Appl. **17**(5), 054026 (2022).
25. S. A. Mikhailov, Phys. Rev. **58**(3), 1517 (1998).
26. I. Kukushkin, J. Smet, S. A. Mikhailov, D. Kulakovskii, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **102**(8), 081301 (2020).
27. V. Muravev, P. Gusikhin, A. Zarezin, A. Zabolotnykh, V. Volkov, and I. Kukushkin, Phys. Rev. **102**(8), 081301 (2020).
28. I. V. Zagorodnev, A. A. Zabolotnykh, D. A. Rodionov, and V. A. Volkov, Nanomaterials **13**(6), 975 (2023).
29. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, A. N. Taldenkov, I. A. Karateev, A. M. Tokmachev, and V. G. Storchak, J. Alloys Compd. **884**, 161078 (2021).
30. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, A. N. Taldenkov, M. G. Rybin, A. M. Tokmachev, and V. G. Storchak, Small **19**, 2301295 (2023).
31. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, A. N. Taldenkov, A. M. Tokmachev, and V. G. Storchak, Carbon **218**, 118769 (2024).
32. A. D. Boardman, *Electromagnetic surface modes*, John Wiley & Sons Chichester, N.Y., Brisbane, Toronto, Singapore (1982).
33. L. Zheng and S. D. Sarma, Phys. Rev. B **53**, 9964 (1996).
34. V. M. Muravev and I. V. Kukushkin, Phys.-Uspekhi **63**(10), 975 (2020).

О нелинейных двух- и трехкомпонентных уравнениях Клейна–Гордона, допускающих локализованные решения с эффектом биений связанных осцилляторов

Р. К. Салимов⁺¹⁾, Т. Р. Салимов*, Е. Г. Екомасов⁺

⁺Уфимский университет науки и технологий, 450076 Уфа, Россия

*Московский физико-технический институт, 117303 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 22 марта 2024 г.

После переработки 11 апреля 2024 г.

Принята к публикации 13 апреля 2024 г.

В данной работе представлены уравнения для двух и трех скалярных полей, допускающие локализованные решения, которые проявляют эффект биений связанных осцилляторов. Периодически амплитуда колебаний локализованного возмущения для одного поля постепенно уменьшается до минимума, а остальных скалярных полей – увеличивается до максимума, затем процесс повторяется в обратном направлении. При этом, первоначально другие поля, кроме одного, находятся либо в состоянии фоновой решения с малой амплитудой, либо равны нулю. Подобные решения могут быть интересны с точки зрения аналогии с осцилляциями нейтрино. Представлены так же уравнения движения, в которых при возмущении одной из компонент обязательно появляется возмущение второй и третьей даже при нулевом фоновом состоянии. Показано, что для этих уравнений выполняется закон сохранения энергии.

DOI: 10.31857/S1234567824100124, EDN: VMYZVM

Солитоноподобные решения нелинейных уравнений часто рассматриваются как протяженные модели частиц [1–6]. Например, модель Скирма [7–9], описывающая внутреннюю структуру барионов и легких ядер. Одним из недостатков солитонного подхода является достаточно малое количество не комплекснозначных моделей, имеющих устойчивые локализованные решения для двух и более компонент. Ранее в [10] были рассмотрены нелинейные уравнения Клейна–Гордона с нелинейностью дробной степени вида $\frac{u}{(u^2+v^2)^{(n/(2n+1))}}$, имеющие двухкомпонентные локализованные, не расплывающиеся в течение всего времени наблюдения численные решения в 2D случае. Подобные модели интересны тем, что для них нет ограничения размерности, как, например, для уравнения sin-Гордон, которое имеет не распадающиеся бризерные решения только в пространственно одномерном случае. Но подобные долгоживущие локализованные решения в 2D случае были возможны лишь при определенных начальных условиях. Естественным продолжением исследования уравнений с подобной нелинейностью будет рассмотрение уравнений, имеющих локализованные решения для всех скалярных полей при локализованном возмущении одного из них, при любых начальных услови-

ях. В таких моделях потенциально возможно перераспределение энергии из локализованного решения для одного поля в локализованное решение для другого. Численные эксперименты показывают справедливость этого предположения.

Для простоты рассматриваем пространственно одномерный случай. Далее воспользуемся векторными обозначениями. Численно исследовались решения уравнений вида (1) для двух и трех компонент ($r = 2, 3$)

$$\mathbf{u}_{xx} - \mathbf{u}_{tt} = \alpha |\mathbf{u}|^{\delta-1} \mathbf{u}, \quad \mathbf{u} = (u^1, \dots, u^r) \quad (1)$$

Подобная векторная запись напоминает многокомпонентные обобщения связанных уравнений НУШ [11, 12]. В отличие от этих уравнений, в которых локализованные связанные решения возможны при нелинейности в виде степеней с натуральными показателями [12], в системах типа (1) такие долгоживущие локализованные многокомпонентные решения удалось получить только при нелинейности дробной степени меньше единицы. В частности, исследовались уравнения вида (1) для $r = 2$ с нелинейностью вида $\sin(|\mathbf{u}|)\mathbf{u}/|\mathbf{u}|$, являющиеся обобщениями уравнения sin-Гордон. При существовании начальных фоновых колебаний компоненты u^2 локализованное возмущение быстро расплывалось. Только в случае $u^2 = 0$ обычного уравнения sin-

¹⁾e-mail: salimovrkr@yandex.ru

Гордон сохранялось локализованное решение. Этот случай использовался для тестирования численной схемы.

В работе в основном представлены результаты для значения $\delta = \frac{1}{11}$ как частного случая рациональной степени $\delta = \frac{k}{n}$. Функция вида $|\mathbf{u}|^{\delta-1}\mathbf{u}$, $n > k$ является наиболее простым видом нечетной по u^i функции, которая остается нелинейной вблизи нуля. Отличия подобных моделей от моделей с нелинейностями в виде натуральных степеней были указаны выше. Эмпирически было установлено, что при уменьшении параметра δ уменьшается первоначальное излучение из локализованного решения и уменьшается период биений. Поэтому для наглядности существования эффекта биений было выбрано значение $\delta = \frac{1}{11}$, нечетность k и n здесь не существенна, важна лишь малость δ . Дальнейшее уменьшение параметра δ приводит к более быстрому изменению функции $|\mathbf{u}|^{\delta-1}\mathbf{u}$ вблизи нуля. При этом для сохранения точности требуется меньший шаг по времени, что повышает трудоемкость расчетов.

Также исследовались эти уравнения со слагаемыми, содержащими первые производные по времени и сохраняющими консервативность системы.

$$\mathbf{u}_{xx} - \mathbf{u}_{tt} = \alpha |\mathbf{u}|^{\delta-1}\mathbf{u} + F(\mathbf{u})\mathbf{u}_t, \quad \mathbf{u} = (u^1, \dots, u^r). \quad (2)$$

Здесь F – кососимметрическая матрица вида $f(|\mathbf{u}|)A$, где f – скалярная функция, A – кососимметрическая матрица. Эти уравнения обеспечивают сохранение энергии.

Действительно, умножим уравнение для каждой компоненты u^i на соответствующую производную u_t^i и сложим все уравнения. В силу кососимметричности матрицы A сумма $A_{ij}u_t^j u_t^i = 0$. Далее интегрируем по x и получаем закон сохранения

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \left(\frac{\alpha |\mathbf{u}|^{\delta+1}}{\delta+1} + \frac{\mathbf{u}_x \cdot \mathbf{u}_x}{2} + \frac{\mathbf{u}_t \cdot \mathbf{u}_t}{2} \right) dx = 0. \quad (3)$$

При расчетах использовался самый простой вид кососимметричной матрицы A из ± 1 на недиагональных элементах.

Численное исследование уравнений с дробной степенью достаточно специфично. Поэтому, из соображений устойчивости, при численном исследовании использовался псевдоспектральный метод, ранее уже применявшийся для решения уравнений типа Клейна–Гордона [13]. Решение раскладывалось в ряд по тригонометрическим функциям. Далее коэффициенты разложения находились разностным по времени методом с помощью метода Рунге–Кутты четвертого порядка. Количество функций составляло порядка 1000 для конечной длины $R = 20 - 30$.

Ограничение по конечному времени счета проводилось из соображений контроля сохранения энергии. При потере энергии в системе из-за численных погрешностей порядка 10^{-2} от начальной (на временах $t \sim 200$) счет прекращался.

В численных экспериментах для уравнения (1) при $r = 2$, $\alpha = 1$ и при начальных условиях вида

$$u^1(x, 0) = \frac{1}{\cosh(2(x - x_0))}; \quad u_t^1(x, 0) = 0 \quad (4)$$

$$u^2(x, 0) = 0; \quad u_t^2 = \frac{0.1}{\cosh(2(x - x_0))}; \quad (5)$$

получаем локализованные решения с периодическим перераспределением энергии из локализованного решения одной компоненты поля в другую. На рисунках 1 и 2 показано изменение во времени уровня

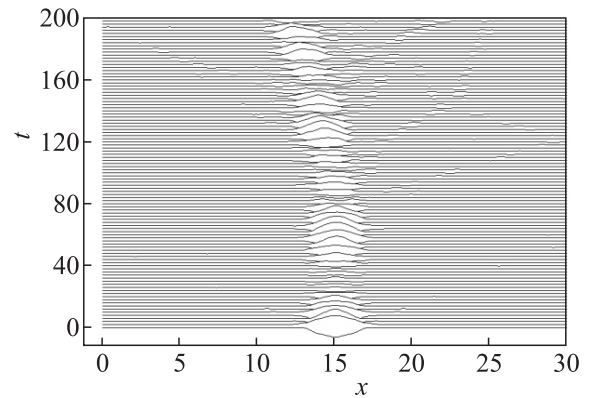


Рис. 1. Изменение со временем локализованного решения для 1-й компоненты u^1 для уравнения (1)

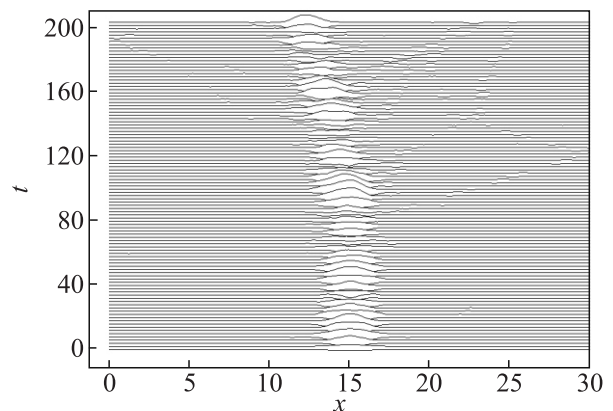


Рис. 2. Изменение со временем локализованного решения для 2-й компоненты u^2 для уравнения (1)

компонент u^1 и u^2 . На этих рисунках видно, что когда амплитуда колебаний локализованного решения

для одного скалярного поля максимальна, для другого скалярного поля она минимальна.

На рисунке 3 показаны изменения максимальных амплитуд локализованных решений для каждой компоненты поля (u^1, u^2) . Здесь видна аналогия с биениями связанных осцилляторов.

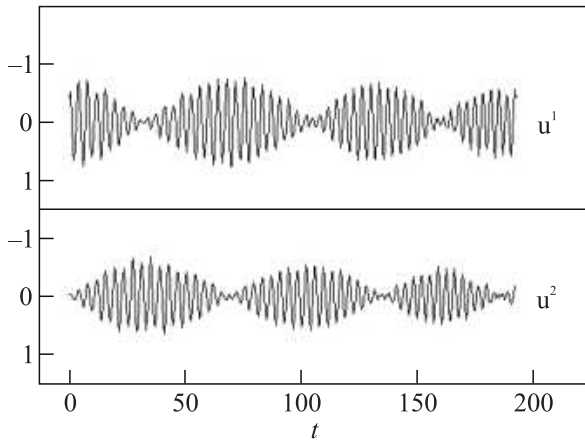


Рис. 3. Изменения максимальных амплитуд локализованных решений для каждой компоненты поля (u^1, u^2) для уравнения (1)

Численно исследовалось также трехкомпонентное уравнение (1). При этом также наблюдался эффект биений связанных осцилляторов и некоторое излучение энергии из локализованного состояния. Наиболее стабильные решения при исследовании уравнения для 3 компонент наблюдались в случае уравнения (2) при $\alpha = 1$ и при начальных условиях вида

$$u^1(x, 0) = 0.1 + \frac{1.5}{\cosh(2(x - x_0))}; u_t^1(x, 0) = 0 \quad (6)$$

$$u^2(x, 0) = 0; u_t^2 = 0.1; \quad (7)$$

$$u^3(x, 0) = 0; u_t^3 = -0.06; \quad (8)$$

и функции f вида

$$f = \frac{1}{|u|^{1/2}} - \frac{1}{0.2}; |u|^{1/2} < 0.2, \quad (9)$$

$$f = 0; |u|^{1/2} \geq 0.2. \quad (10)$$

В этом случае получаем локализованные решения с периодическим перераспределением энергии из локализованного решения одной компоненты поля в две другие и обратно. На рисунке 4 показано изменение во времени уровня функции u^2 .

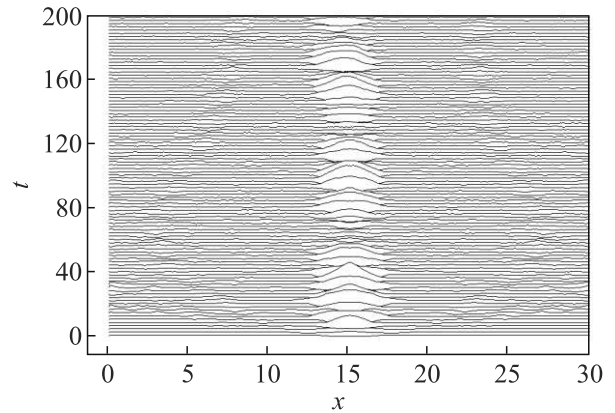


Рис. 4. Изменение со временем локализованного решения для скалярного поля u^2 для уравнения (2)

На рисунке 5 показаны изменения максимальных амплитуд локализованных решений для каждой компоненты поля u^1, u^2, u^3 для уравнения (2). На рисунках 4 и 5 видно, что энергия из локализованного решения компоненты u^1 переносится в локализованные решения для компонент u^2, u^3 . Подобное наблюдается и для других значений амплитуды начальных фоновых колебаний полей u^2 и u^3 .

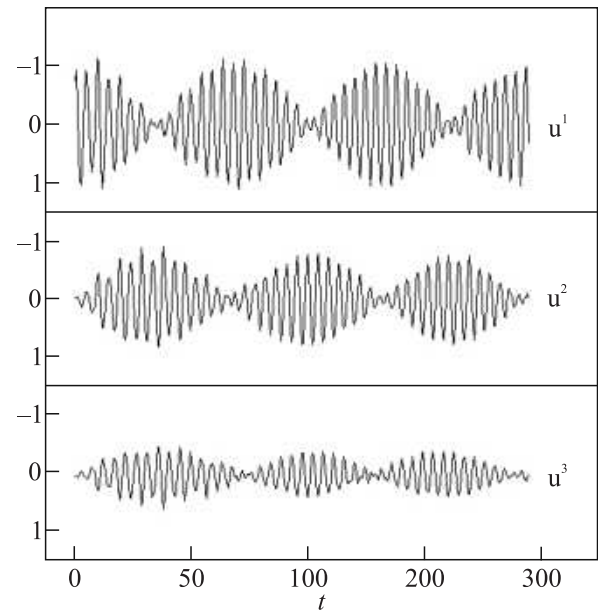


Рис. 5. Изменения максимальных амплитуд локализованных решений для каждой компоненты поля u^1, u^2, u^3 для уравнения (2)

Подобный результат представляется достаточно интересным, так как имеет некую аналогию с осцилляциями 3 сортов нейтрино, или, другими словами, с превращениями одного типа нейтрино в нейтрино другого сорта [14, 15]. Действительно, в представлен-

ной модели мы наблюдаем периодический процесс, при котором амплитуда колебаний локализованного возмущения для одного поля постепенно уменьшается до минимума, а остальных скалярных полей – увеличивается до максимума, затем процесс повторяется в обратном направлении.

Рассмотрим теперь кратко, в рамках проведенных численных экспериментов, как меняются решения при изменении начальных условий и параметров. Влияние начальных условий проявляется в том, что величина амплитуд биений и их период зависит от величины малых начальных амплитуд фоновых колебаний. Так, например, при изменении начальных условий (6)–(8) для 3-й компоненты до значения $u^3 = -0.1$ увеличивается максимальная амплитуда колебаний 3-й компоненты u^3 , которая становится равна максимальной амплитуде колебаний 2-й компоненты u^2 . Также от величины начальной амплитуды начальных фоновых колебаний зависит период биений амплитуды, в частности, при уменьшении начальной амплитуды компоненты u^2 для уравнения (1) увеличивался период биений.

Как уже отмечалось выше, при увеличении параметра δ увеличивается первоначальное излучение из локализованного решения и увеличивается период биений. Например, при $\delta = 5/11$ для уравнения (1) при начальных условиях (4)–(5) период установившихся биений увеличился в 2 раза по сравнению со случаем $\delta = 1/11$. При значении $\delta = 1/2$ для уравнения (1) при начальных условиях (4)–(5) в установившемся режиме начальное возмущение разбивается на три локализованных решения, примерно одинаковых размеров и формы, период установившихся биений увеличивается более, чем в 2 раза по сравнению со случаем $\delta = 1/11$. При $\delta = 1/11$ для уравнения (1) при тех же начальных условиях наблюдается одно локализованное решение большой амплитуды см. рис. 1.

Из уравнения (1) видно, что если существуют решения вида $u^i(x, t)$ для одного параметра α , то будут существовать решения вида $\lambda u^i(\beta x, \beta t)$, для изменившегося параметра $\gamma\alpha$. При этом выполняется соотношение $\lambda^{1-\delta}\beta^2 = \gamma$. В численных экспериментах для уравнения (1) увеличение параметра α ($\alpha = 1, 2, 4$) при одинаковых начальных условиях (4), (5) приводит к увеличению частоты, уменьшению размеров и увеличению амплитуды установившихся решений. Таким образом, поведение решений качественно соответствует соотношению $\lambda^{1-\delta}\beta^2 = \gamma$. Период биений при этом существенно не меняется.

Влияние слагаемого с кососимметричной матрицей можно наблюдать, сравнивая поведение решений

с этим слагаемым и без него при прочих равных условиях. В основном действие этих слагаемых проявляется себя наиболее сильно при нулевых и очень малых ($\sim 0, 01$) амплитудах фоновых колебаний невозмущенных компонент. Так, например, при возмущении одной компоненты при начальном нулевом состоянии ($r = 2, u_t^1 = 0, u^2 = 0, u_t^2 = 0$) системы (2) при функции

$$f = \exp(|\mathbf{u}|) - \exp(0.2); |\mathbf{u}| < 0.2, \quad (11)$$

$$f = 0; |\mathbf{u}| \geq 0.2 \quad (12)$$

и начальном возмущении $u^1 = 1.2/\cosh(2(x - x_0))$ проявляется эффект биений. Без этого слагаемого, как и ожидалось, биения не наблюдаются. При очень малых фоновых колебаниях (~ 0.01) это слагаемое наиболее сильно влияет на период биений. При значениях амплитуд начальных фоновых колебаний порядка (~ 0.1) влияние слагаемого с кососимметричной матрицей не является определяющим.

Хотя уравнения (2) в общем не являются лоренц-инвариантными, при определенных условиях их можно сделать таковыми. Пусть функция f не равна нулю, только если ее какой-либо лоренц-инвариантный аргумент меньше некоторой константы, например, $f(|\mathbf{u}|) = 0$ при $|\mathbf{u}| > |\mathbf{u}_0|$. Тогда при устойчивом фоновом решении, при котором функция f остается равной нулю, уравнения можно рассматривать как лоренц-инвариантные. Под устойчивостью здесь будем понимать свойство возвращения к первоначальному состоянию при возмущениях. При этом небольшие отклонения от устойчивого решения можно рассматривать как временные нарушения лоренц-инвариантности и Т-четности. Возможность подобного механизма для уравнений (2) может представлять интерес с точки зрения рассмотрения связи нарушения СРТ четности с физикой нейтрино. Вопрос об этой связи является достаточно актуальным [16, 17].

Также интерес представляет возможность изменения в процессе эволюции решения функции f , такого, что первоначально f была не нулевой, а затем стала равна нулю везде. Таким образом появляется механизм первоначального нарушения лоренц-инвариантности и Т-четности, который затем проявляться не будет. В свою очередь, это первоначальное нарушение Т-четности, может привести к первоначальному нарушению других симметрий. Кроме того, модель (2) интересна тем, что в данном уравнении есть слагаемые, обеспечивающие некий конформизм для комбинаций полей, так как при возмуще-

нии одной из компонент обязательно появляется возмущение других. Учитывая описанные потенциальные возможности, представленные модели, по мнению авторов, достойны дальнейшего изучения. Кроме того они имеют перспективы получения локализованных решений в 2D и 3D случаях.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Уфимского университета науки и технологий – федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. H. Yamanoto, Progress of Theoretical Physics **58**(3), 1014 (1977)
2. A. M. Kosevich, Physica D **41**, 253 (1990).
3. Yu. P. Rybakov and B. Saha, Phys. Lett. A **122**, 5 (1996).
4. N. S. Manton, Nonlinearity **21**(11), T221 (2008).
5. A. Maccari, EJTP **3**(10), 39 (2006).
6. В. Г. Маханьков, Физика элементарных частиц и атомного ядра **14**, 123 (1983).
7. В. Г. Маханьков, Ю. В. Рыбаков, В. И. Санюк, УФН **162**(2), 1 (1992).
8. C. Adam, C. Naya, J. Sanchez-Guillen, and A. Wereszczynski, Phys. Rev. Lett. **111**, 232501 (2013).
9. C. Naya and P. Sutcliffe, Phys. Rev. Lett. **121**(23), 232002 (2018).
10. Р. К. Салимов, Т. Р. Салимов, Е. Г. Екомасов, Письма в ЖЭТФ **112**(6), 357 (2020).
11. В. С. Герджиков, Н. А. Костов, Т. И. Валчев, ТМФ **159**(3), 438 (2009).
12. A. S. Desyatnikov, D. E. Pelinovsky, and J. Yang, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika **12**(7), 35 (2006).
13. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, М. (1988).
14. С. С. Герштейн, Е. П. Кузнецов, В. А. Рябов, УФН **167**(8), 811 (1997).
15. С. М. Биленький, УФН **173**(11), 1171 (2003).
16. И. С. Цукерман, УФН **175**(8), 863 (2005).
17. А. Е. Лобанов, А. Е. Чухнова, ЖЭТФ **162**(3), 364 (2022).

Содержание

Том 119, выпуск 9

Астрофизика и космология

- Воротынцева Ю.С., Левшаков С.А. Торсионно-вращательные переходы в метаноле как зонды фундаментальных физических постоянных – масс электрона и протона 635

Оптика, лазерная физика

- Гулина Ю.С., Рупасов А.Е., Красин Г.К., Буслеев Н.И., Гриценко И.В., Богацкая А.В., Кудряшов С.И. Взаимосвязь параметров двулучепреломления и иерархической пространственной структуры микротрещок, записанных в объеме плавленого кварца ультракороткими лазерными импульсами 638

- Головизин А., Мишин Д., Проворченко Д., Трегубов Д., Колачевский Н. Сличение двух оптических часов на атомах тулия с использованием синхронного опроса 645

- Новиков И.А., Кирьянов М.А., Стадничук В.И., Долгова Т.В., Федянин А.А. Времяразрешающее детектирование терагерцового отклика фотодинамически сформированных плазмонных метаповерхностей 651

- Поддубская О.Г., Новицкий А.В., Минин О.В., Минин И.В. Устойчивость формирования изображения с использованием тераструктуры относительно сдвига пучка 658

Конденсированное состояние

- Старчиков С.С., Заяханов В.А., Троян И.А., Быков А.А., Булатов К.М., Васильев А.Л., Перекалин Д.С., Снегирёв Н.И., Куликова Е.С., Давыдов В.А., Любутин И.С. Термические превращения ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ при давлении 10 ГПа и температурах до 2200 К 668

- Никулин Ю.В., Хивинцев Ю.В., Селезнев М.Е., Высоцкий С.Л., Сахаров В.К., Кожевников А.В., Дудко Г.М., Хитун А.Г., Никитов С.А., Филимонов Ю.А. Спиновая накачка в структурах YIG/Pt: роль сингулярностей ван Хова 676

- Дедов Г.С., Шориков А.О. Теоретическое исследование влияния эпитаксиальной деформации на структурные и магнитные свойства тонкой пленки YFeO_3 на подложке SrTiO_3 684

- Зиновьева А.Ф., Зиновьев В.А., Кацюба А.В., Володин В.А., Муратов В.И., Двуреченский А.В. Рост силицена методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, модифицированных электронным облучением 692

- Сухорукова О.С., Тарасенко А.С., Тарасенко С.В., Шавров В.Г. Электромагнитная прозрачность магнитной гетероструктуры в условиях многоволновой интерференции 697

Методы теоретической физики

- Хайдуков З.В. Дзета-регуляризация в эффекте разделения киральностей 707

Биофизика

- Romanova S.A., Berezhnoy A.K., Ruppel L.E., Aitova A.A., Bakumenko S.S., Semidetnov I.S., Naumov V.D., Slotvitsky M.M., Tselaya V.A., Agladze K.I. Discrete anisotropy model of heterogeneous cardiac tissue predicting the occurrence of symmetry breaking of reentrant activity 712

Разное

- Дмитриев А.А., Барышникова К.В., Рыбин М.В. Исключительные точки в тримерах диэлектрических цилиндров 714

Содержание
Том 119, выпуск 10
Поля, частицы, ядра

Родкин Д.М., Чуви́льский Ю.М. Вычисление сечений резонансного рассеяния нейтронов на ядре ${}^9\text{Be}$ с использованием данных ab initio расчетов асимптотических нормировочных коэффициентов и распадных ширин	723
--	-----

Kotikov A.V., Lipatov A.V., Zhang P.M. Shadowing and antishadowing in the rescaling model ..	729
--	-----

Gorsky A., Pikalov A. Schwinger-like pair production of baryons in electric field	731
---	-----

Оптика, лазерная физика

Киняевский И.О., Корибут А.В., Грудцын Я.В., Ионин М.В. Преобразование частоты фемтосекундного импульса титан-сапфирового лазера в длинноволновую область среднего ИК диапазона в кристалле $\text{BaGa}_2\text{GeSe}_6$	733
--	-----

Павлов Д.В., Черепахин А.Б., Жижченко А.Ю., Сергеев А.А., Мицай Е.В., Кучмижак А.А., Кудряшов С.И. Генерация третьей гармоники в плазмонных метаповерхностях, изготовленных методом прямой фемтосекундной лазерной печати	738
---	-----

Конденсированное состояние

Лобанов И.С., Уздин В.М. Динамика “дышащих” скирмионов	744
--	-----

Соколова М.С., Джикирба К.Р., Астраханцева А.С., Кукушкин И.В., Муравьев В.М. Плазменный отклик металлической “решетчатой” метаповерхности на подложке	752
--	-----

Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Медведев А.С. Многоцелевая сверхпроводимость немагнитного стехиометрического пниктида $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$	757
--	-----

Mukhachev R.D., Lukoyanov A.V., Kuchin A.G. Antiferromagnetic-to-ferromagnetic transition in the $\text{GdNiSi}_{1-x}\text{Al}_x$ compound	764
--	-----

Podivilov E., Masnev N., Sturman B. Impact of domain wall conduction on ferroelectric domain reversal kinetics	766
--	-----

Петров А.С., Свинцов Д.А. Высокочастотный эффект Холла и поперечно-электрические гальваномагнитные волны в двумерных электронных системах с постоянным током	768
--	-----

Нелинейные явления

Салимов Р.К., Салимов Т.Р., Екомасов Е.Г. О нелинейных двух- и трехкомпонентных уравнениях Клейна–Гордона, допускающих локализованные решения с эффектом биений связанных осцилляторов	775
--	-----