

Том 120, Выпуск 7–8

ISSN 0370-274X
Октябрь 2024



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

2024 г. Том 120 вып. 7, стр. 479–568
2024 г. Том 120 вып. 8, стр. 569–656



НАУКА
— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 120

Выпуск 7

10 октября 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>

© Российская академия наук, 2024

© Редакция журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2024

Посвящается памяти Алексея Александровича Старобинского

Альтернативная идея об источнике барионной асимметрии во Вселенной

С. Н. Вергелес¹⁾

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

Московский физико-технический институт, Кафедра теоретической физики, 141707 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 30 мая 2024 г.

После переработки 19 августа 2024 г.

Принята к публикации 30 августа 2024 г.

В работе предложен альтернативный сценарий возникновения барионной асимметрии во Вселенной. Этот сценарий реализуется в модели решеточной гравитации, связанной с дираковским полем, следующим образом. При сверхвысоких температурах порядка Великого Объединения $T_c \sim 10^{18}$ ГэВ и выше система находится в PT -симметричной фазе. Но при понижении температуры происходит фазовый переход в несимметричную фазу, в которой появляется ненулевая тетрада, т.е. пространство-время с метрикой Минковского, и волновая функция системы распадается на две: $|\rangle = |+\rangle + |-\rangle$. Поля тетрад в состояниях $|+\rangle$ и $|-\rangle$ различаются знаком. В самый первый момент времени длительностью порядка планковского возможен переход фермионов между этими состояниями. Эти переходы в разных участках пространства не скоррелированы между собой. Поэтому окончательная асимметрия фермионного заряда между этими состояниями относительно чрезвычайно мала, и она сохраняется во времени, так как взаимодействие состояний $|+\rangle$ и $|-\rangle$ прекращается на временах больше планковского.

DOI: 10.31857/S0370274X24100012, EDN: YUBSFХ

Введение. Проблема существования барионной асимметрии во Вселенной не решена в настоящее время. Большая информация, а также значительное множество ссылок по этой проблеме содержатся в обзорах [1, 2]. Здесь мы коротко отметим лишь следующие факты.

1) Обычно предполагается, что электрослабый фазовый переход, спонтанно нарушающий симметрию $SU(2)_L \times U(1)_Y$, является переходом первого рода. Накопление барионов происходит в непосредственной близости к точке этого перехода в несимметричной фазе, причем доменные стенки зародышей и пузырей несимметричной фазы ускоряют процесс [1, 3].

2) Все подходы к решению проблемы (например, использование механизма Кобаяси–Маскавы в Стандартной модели или так называемого сфалеронного бариогенезиса, заложенного Кузьминым, Рубаковым и Шапошниковым) приводят к оценкам средней барионной плотности, меньше наблюдаемой на много порядков ($< 10^{-5}$).

Здесь представлен альтернативный сценарий накопления барионной асимметрии на самом раннем

этапе развития Вселенной. Этот сценарий возможен в решеточной теории гравитации. В работах автора [4–10] изучалась решеточная теория гравитации, связанная с дираковскими полями. В частности, в работе [8] была описана дискретная $\mathbb{Z}_2$ -симметрия (названная PT -симметрией), взаимно переставляющая дираковское и его сопряженное поля и меняющая знак тетрады. В работе [10] было доказано, что при сверхвысоких температурах эта PT -симметрия не нарушена, но при понижении температуры PT -симметрия нарушается. В настоящей работе показано, что в несимметричной фазе в непосредственной близости к точке фазового перехода по температуре и времени симметричная волновая функция (в.ф.) Вселенной распадается на суперпозицию двух в.ф. $|+\rangle$ и $|-\rangle$. В течение этого малого планковского времени $\tau \sim t_P \approx \sqrt{8\pi G\hbar/c^5} \approx 10^{-43}$ с матричный элемент $\langle +|\mathcal{H}_\Psi|-\rangle \neq 0$. Поскольку гамильтониан сохраняет полное число фермионов, то в указанном неравенстве содержатся амплитуды переходов фермионов из $|-\rangle$ в $|+\rangle$, и наоборот. При временах $t > \tau$ имеем $\langle +|\hat{\mathcal{O}}|-\rangle = 0$ для всех локальных операторов $\hat{\mathcal{O}}$. Поэтому накопившийся за время τ дисбаланс фермионов между состояниями $|+\rangle$ и $|-\rangle$ сохраняется, что и является источником барионной асимметрии.

¹⁾e-mail: vergeles@itp.ac.ru

Попытаемся объяснить физику явления на предельно простом примере из одномерной квантовой механики. Пусть одночастичный гамильтониан имеет вид $\mathcal{H} = -(1/2m)d^2/dx^2 - \kappa[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$. Этот гамильтониан симметричен относительно преобразования четности $x \rightarrow -x$, но из двух связанных состояний одно $\phi_s(x)$ является четным, а другое $\phi_a(x)$ — нечетным. Их линейные комбинации $\phi_{\pm}(x) = \phi_s(x, t) \pm \phi_a(x, t)$ не являются стационарными, переходят друг в друга при преобразовании четности и описывают в.ф. состояний, в которых частица находится вблизи $x = \pm a$ соответственно. Если частица находится в состоянии $\phi_+(x)$, то через некоторое время она окажется в состоянии $\phi_-(x)$, и т.д. Если же в некий момент времени возникает непроницаемый барьер в точке $x = 0$, то вероятности обнаружения частицы в области $x > 0$ и $x < 0$ “замерзают”, не являясь, вообще говоря, равными. Нечто подобное происходит в изучаемой модели. Хотя действие системы является PT -инвариантным, состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$ таковыми не являются и они переходят друг в друга при PT -преобразовании. В.ф. $\phi_{\pm}$ являются упрощенными аналогами состояний $|\pm\rangle$. Последние являются суперпозицией многих состояний, в том числе с различными значениями ферми-частиц. Упомянутый выше “непроницаемый барьер” между состояниями ϕ_+ и ϕ_- в рассматриваемой модели возникает спонтанно и в течение минимального времени t_P .

Рассмотрение носит модельный характер.

Следует заметить, что настоящая работа не является пионерской в том смысле, что гравитация как источник барионной асимметрии впервые рассматривалась в [11]. В этой работе вводилось в лагранжиан дополнительное слагаемое $\{(1/M_*^2)\sqrt{-g}(\partial_\mu \mathfrak{R})J_B^\mu\}$, нарушающее CP -инвариантность. Здесь $\mathfrak{R}$ — скалярная кривизна, J_B^μ — барионный несохраняющийся ток и M_*^2 — параметр обрезания эффективной теории. Из последних работ, развивающих эту идею, отметим работы [12, 13], в которых можно найти множество ссылок по этой тематике. Не вдаваясь в подробности, укажем на фундаментальное различие нашего подхода к проблеме с подходом в работах [11–13]: в последнем подходе изучается континуальная теория гравитации, в которую исходно вносится CP — неинвариантное слагаемое; в нашем подходе изучается решеточная, т.е. регуляризованная, теория гравитации, которая инвариантна относительно всех симметрий в высокотемпературной фазе, но в результате спонтанного фазового перехода в низкотемпературную фазу с потерей PT -симметрии генерируется барионная асимметрия (см. текст ниже).

Для облегчения чтения статьи в следующем разделе дается определение той модели решеточной гравитации, которая здесь изучается.

Определение решеточной теории гравитации. Рассмотрим ориентируемый 4-мерный симплициальный комплекс $\mathfrak{K}$. Мы рекомендуем книгу [14], §§ 2, 4 для ознакомления с определением абстрактных симплициальных комплексов. Предположим, что каждый его 4-симплекс принадлежит такому подкомплексу $\mathfrak{K}' \in \mathfrak{K}$, который имеет геометрическую реализацию в $\mathbb{R}^4$ без пустот. Вершины обозначаются a_V , индексы V и W нумеруют вершины и 4-симплексы s_W^4 соответственно. Необходимо использовать локальную нумерацию вершин, принадлежащих заданному 4-симплексу: все 5 вершин 4-симплекса s_W^4 нумеруются как $a_{V(W)i}$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$. В дальнейшем обозначения с дополнительным нижним индексом (W) указывает на принадлежность соответствующей величины 4-симплексу s_W^4 . Обозначим $\varepsilon_{V(W)1V(W)2V(W)3V(W)4V(W)5} = \pm 1$ символ Леви–Чивита. Верхний (нижний) знак зависит от ориентации 4-симплекса $s_W^4 = a_{V(W)1}a_{V(W)2}a_{V(W)3}a_{V(W)4}a_{V(W)5}$. Элемент компактной группы $\text{Spin}(4)$ и элемент алгебры Клиффорда

$$\begin{aligned} \Omega_{V_1V_2} &= \Omega_{V_2V_1}^{-1} = \exp(\omega_{V_1V_2}) = \\ &= \exp\left(\frac{1}{2}\sigma^{ab}\omega_{V_1V_2}^{ab}\right) \in \text{Spin}(4), \quad \sigma^{ab} \equiv \frac{1}{4}[\gamma^a\gamma^b], \\ \gamma^a\gamma^b + \gamma^b\gamma^a &= 2\delta^{ab}, \quad a = 1, 2, 3, 4, \quad \gamma^5 \equiv \gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4, \\ \hat{e}_{V_1V_2} &\equiv e_{V_1V_2}^a\gamma^a \equiv -\Omega_{V_1V_2}\hat{e}_{V_2V_1}\Omega_{V_1V_2}^{-1}, \\ |e_{V_1V_2}| < 1, \quad |e_{V_1V_2}| &\equiv \sqrt{\sum_a (e_{V_1V_2}^a)^2} \end{aligned} \quad (1)$$

определены на каждом ориентированном 1-симплексе $a_{V_1}a_{V_2}$. По предположению, множество переменных $\{\Omega, \hat{e}\}$ является множеством независимых динамических переменных. Фермионные степени свободы (дираковские спиноры) определены на вершинах комплекса:

$$\Psi_V^\dagger, \quad \Psi_V. \quad (2)$$

Множество переменных $\{\Psi^\dagger, \Psi\}$ взаимно независимы, причем спиноры $\Psi_V^\dagger$ и Ψ_V находятся во взаимной инволюции (или анти-инволюции) относительно операции эрмитова сопряжения.

Рассмотрим модель с действием

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}_g + \mathfrak{A}_\Psi + \mathfrak{A}_{\Lambda_0}. \quad (3)$$

Здесь $\mathfrak{A}_g$ и $\mathfrak{A}_\Psi$ являются действиями чистой гравитации и дираковского поля соответственно:

$$\mathfrak{A}_g = -\frac{1}{5! \cdot 2 \cdot l_P^2} \sum_{\mathcal{W}} \times \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \times \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})} \\ & \times \text{tr} \gamma^5 \left\{ \Omega_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})} \Omega_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})} \times \right. \\ & \times \left. \Omega_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})} \hat{e}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})} \hat{e}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})} \right\}. \end{aligned}$$

Каждая σ является одной из $5!$ перестановок вершин $\mathcal{V}_{(W)i} \rightarrow \sigma(\mathcal{V}_{(W)i})$.

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_{\Psi} &= \frac{1}{5 \cdot 24^2} \times \\ & \times \sum_W \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})} \times \\ & \times \text{tr} \gamma^5 \left\{ \hat{\Theta}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})} \hat{e}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})} \times \right. \\ & \times \left. \hat{e}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})} \hat{e}_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})} \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}_{\nu_1 \nu_2} &\equiv \Theta_{\nu_1 \nu_2}^a \gamma^a = \hat{\Theta}_{\nu_1 \nu_2}^{\dagger}, \quad (6) \\ \Theta_{\nu_1 \nu_2}^a &= \frac{i}{2} \left(\Psi_{\nu_1}^{\dagger} \gamma^a \Omega_{\nu_1 \nu_2} \Psi_{\nu_2} - \Psi_{\nu_2}^{\dagger} \Omega_{\nu_2 \nu_1} \gamma^a \Psi_{\nu_1} \right). \end{aligned}$$

Можно проверить, что (ср. с (1))

$$\hat{\Theta}_{\nu_1 \nu_2} \equiv -\Omega_{\nu_1 \nu_2} \hat{\Theta}_{\nu_2 \nu_1} \Omega_{\nu_1 \nu_2}^{-1}. \quad (7)$$

Вклад в решеточное действие от космологической постоянной имеет вид

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_{\Lambda_0} &= -\frac{1}{5! \cdot 12} \cdot \frac{\Lambda_0}{l_P^2} \varepsilon_{abcd} \times \\ & \times \sum_W \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})} \times \\ & \times e_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)1})}^a e_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)2})}^b \times \\ & \times e_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)3})}^c e_{\sigma(\mathcal{V}_{(W)5})\sigma(\mathcal{V}_{(W)4})}^d. \quad (8) \end{aligned}$$

Статистическую сумму представляется интегралом

$$\begin{aligned} Z &= \prod_{1\text{-simplices}} \int_{|e_{\nu_1 \nu_2}| < 1} \prod_a de_{\nu_1 \nu_2}^a \int d\mu \{ \Omega_{\nu_1 \nu_2} \} \times \\ & \times \prod_{\nu} \int d\Psi_{\nu}^{\dagger} d\Psi_{\nu} \exp(\mathfrak{A}). \quad (9) \end{aligned}$$

Действие (3), а также интеграл (9), инвариантны относительно калибровочных преобразований

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_{\nu_1 \nu_2} &= S_{\nu_1} \Omega_{\nu_1 \nu_2} S_{\nu_2}^{-1}, \quad \tilde{e}_{\nu_1 \nu_2} = S_{\nu_1} e_{\nu_1 \nu_2} S_{\nu_2}^{-1}, \\ \tilde{\Psi}_{\nu} &= S_{\nu} \Psi_{\nu}, \quad \tilde{\Psi}_{\nu}^{\dagger} = \Psi_{\nu}^{\dagger} S_{\nu}^{-1}, \quad S_{\nu} \in \text{Spin}(4). \quad (10) \end{aligned}$$

Проверка этого факта облегчается при использовании соотношения (ср. с соотношением для $\hat{e}_{\nu_1 \nu_2}$ в (10))

$$\tilde{\hat{\Theta}}_{\nu_1 \nu_2} = S_{\nu_1} \hat{\Theta}_{\nu_1 \nu_2} S_{\nu_2}^{-1}, \quad (11)$$

которое непосредственно следует из (10).

Рассматриваемая решеточная модель инвариантна относительно глобальной дискретной $\mathbb{Z}_2$ -симметрии, которая является аналогом комбинированной PT -симметрии. Обозначим $\hat{\mathcal{U}}_{PT}$ оператор этого преобразования. Тогда преобразованные динамические переменные выражаются через исходные переменные следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \Psi_{\nu} \hat{\mathcal{U}}_{PT} &= U_{PT} \left(\Psi_{\nu}^{\dagger} \right)^t, \\ \hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \Psi_{\nu}^{\dagger} \hat{\mathcal{U}}_{PT} &= -(\Psi_{\nu})^t U_{PT}^{-1}, \quad U_{PT} = i\gamma^1 \gamma^3 \\ \hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} e_{\nu_1 \nu_2}^a \hat{\mathcal{U}}_{PT} &= -e_{\nu_1 \nu_2}^a, \quad \hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \omega_{\nu_1 \nu_2}^{ab} \hat{\mathcal{U}}_{PT} = \omega_{\nu_1 \nu_2}^{ab}. \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь верхний индекс “ t ” обозначает транспонирование дираковских матриц и спиноров. Имеем:

$$U_{PT}^{-1} \gamma^a U_{PT} = (\gamma^a)^t, \quad U_{PT}^{-1} \sigma^{ab} U_{PT} = -(\sigma^{ab})^t. \quad (13)$$

Из (12) и (13) следует что

$$U_{PT}^{-1} \Omega_{\nu_1 \nu_2} U_{PT} = (\Omega_{\nu_2 \nu_1})^t, \quad (14)$$

$$\hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \Theta_{\nu_1 \nu_2}^a \hat{\mathcal{U}}_{PT} = -\Theta_{\nu_1 \nu_2}^a. \quad (15)$$

Перейдем к длинноволновому пределу, т.е. к пределу медленно изменяющихся при движении вдоль решетки полей. В этом пределе действие (3) трансформируется в хорошо известное континуальное действие гравитации в форме Палатини и дираковского поля, минимально связанного с гравитацией, плюс вклад космологической постоянной. Этот предельный переход имеет смысл вместе с переходом к сигнатуре Минковского. В результате компактная калибровочная группа $\text{Spin}(4)$ преобразуется в некомпактную группу $\text{Spin}(3, 1)$. Далее в этом разделе все решеточные переменные в случае Евклидовой сигнатуры снабжены штрихом. Для полевых переменных в случае сигнатуры Минковского используются старые обозначения.

Для указанной трансформации действия необходимы следующие деформации контуров интегрирования в интеграле (9):

$$\begin{aligned} \omega_{\nu_1 \nu_2}^{4\alpha} &= i\omega_{\nu_1 \nu_2}^{0\alpha}, \quad \omega_{\nu_1 \nu_2}^{\prime\alpha\beta} = -\omega_{\nu_1 \nu_2}^{\alpha\beta}, \\ e_{\nu_1 \nu_2}^{\prime 4} &= e_{\nu_1 \nu_2}^0, \quad e_{\nu_1 \nu_2}^{\prime\alpha} = ie_{\nu_1 \nu_2}^{\alpha}. \quad (16) \end{aligned}$$

Переменные $\omega_{\mathcal{W}ij}^{ab}$, $e_{\mathcal{W}ij}^a$ в сигнатуре Минковского являются вещественными, и их индексы принимают значения

$$a, b, \dots = 0, 1, 2, 3, \quad \alpha, \beta, \dots = 1, 2, 3. \quad (17)$$

В ортонормированном базисе (ОНБ) метрический тензор $\eta^{ab} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Дираковские матрицы преобразуются как

$$\gamma'^4 = \gamma^0, \quad \gamma'^\alpha = i\gamma^\alpha, \quad \gamma'^5 = \gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (18)$$

Таким образом, для спинных матриц $\sigma^{ab} = (1/4)[\gamma^a, \gamma^b]$ имеем:

$$\sigma'^{4\alpha} = i\sigma^{0\alpha}, \quad \sigma'^{\alpha\beta} = -\sigma^{\alpha\beta}. \quad (19)$$

При помощи (16)–(19) находим:

$$\omega'_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} = \frac{1}{2}\omega_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2}^{ab}\sigma_{ab} \equiv \omega_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2}, \quad \hat{e}'_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} = \gamma_a e_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2}^a \equiv \hat{e}_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2}, \quad (20)$$

$$\Omega'_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} = \exp\left(\frac{1}{2}\omega'_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} \sigma'^{ab}\right) = \exp\left(\frac{1}{2}\omega_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} \sigma_{ab}\right) \equiv \Omega_{\mathcal{V}_1\mathcal{V}_2} \in \text{Spin}(3, 1). \quad (21)$$

При переходе к сигнатуре Минковского дираковские спиноры преобразуются следующим образом:

$$\Psi'_{\mathcal{V}} = \Psi_{\mathcal{V}}, \quad \Psi'^{\dagger}_{\mathcal{V}} = \Psi^{\dagger}_{\mathcal{V}}\gamma^0 = \overline{\Psi}_{\mathcal{V}}. \quad (22)$$

Переход к длинноволновому пределу возможен для таких конфигураций полей, которые достаточно медленно изменяются при переходах от симплекса к симплексу, т.е. при небольших или значительных перемещения по решетке. Это правило касается любых решеток. В нашей теории именно на этапе перехода к длинноволновому пределу возникает необходимость введения локальных координат. Локальные координаты — это маркеры вершин решетки. Рассмотрим некоторый 4D подкомплекс $\mathfrak{K}' \in \mathfrak{K}$ с тривиальной топологией четырехмерного диска и геометрической реализацией в $\mathbb{R}^4$. Таким образом каждая вершина подкомплекса приобретает координаты x^μ , являющиеся координатами образа вершины в $\mathbb{R}^4$:

$$x_{\mathcal{V}}^\mu \equiv x^\mu(a_{\mathcal{V}}), \quad \mu = (0, 1, 2, 3) = (0, i). \quad (23)$$

На этом этапе координаты являются безразмерными. Пусть $s_{\mathcal{W}}^4 \in \mathfrak{K}'$, и обозначим все пять вершин этого 4-симплекса как $\mathcal{V}_i$, $i = 1, 2, 3, 4$ и $\mathcal{V}_m \neq \mathcal{V}_i$. Свойства геометрической реализации таковы, что четыре бесконечно малых вектора

$$dx_{\mathcal{V}_m\mathcal{V}_i}^\mu \equiv x_{\mathcal{V}_i}^\mu - x_{\mathcal{V}_m}^\mu = -dx_{\mathcal{V}_i\mathcal{V}_m}^\mu \in \mathbb{R}^4, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (24)$$

линейно независимы.

В работе [10] доказано, что в $\mathbb{R}^4$ существуют 1-формы $\omega_\mu(x)$ и $\hat{e}_\mu(x)$ такие, что справедливы равенства

$$\omega_\mu \left(\frac{1}{2} (x_{\mathcal{V}_m} + x_{\mathcal{V}_i}) \right) dx_{\mathcal{V}_m\mathcal{V}_i}^\mu = \omega_{\mathcal{V}_m\mathcal{V}_i}, \quad (25)$$

$$\hat{e}_\mu \left(\frac{1}{2} (x_{\mathcal{V}_m} + x_{\mathcal{V}_i}) \right) dx_{\mathcal{V}_m\mathcal{V}_i}^\mu = \hat{e}_{\mathcal{V}_m\mathcal{V}_i}. \quad (26)$$

Выпишем длинноволновый предел действия (3):

$$\mathfrak{A}'_g \longrightarrow i\mathfrak{A}_g, \quad \mathfrak{A}_g = -\frac{1}{4l_P^2} \varepsilon_{abcd} \int \mathfrak{R}^{ab} \wedge e^c \wedge e^d, \\ \frac{1}{2} \sigma_{ab} \mathfrak{R}^{ab} = \frac{1}{2} \sigma_{ab} \mathfrak{R}_{\mu\nu}^{ab} dx^\mu \wedge dx^\nu \\ = (\partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu + [\omega_\mu, \omega_\nu]) dx^\mu \wedge dx^\nu, \quad (27)$$

$$\mathfrak{A}'_\Psi \longrightarrow i\mathfrak{A}_\Psi, \quad \mathfrak{A}_\Psi = \frac{1}{6} \varepsilon_{abcd} \int \Theta^a \wedge e^b \wedge e^c \wedge e^d, \\ \Theta^a = \frac{i}{2} [\overline{\Psi} \gamma^a \mathcal{D}_\mu \Psi - (\overline{\mathcal{D}_\mu \Psi}) \gamma^a \Psi] dx^\mu, \\ \mathcal{D}_\mu = (\partial_\mu + \omega_\mu), \quad (28)$$

$$\mathfrak{A}'_{\Lambda_0} \longrightarrow i\mathfrak{A}_{\Lambda_0}, \quad \mathfrak{A}_{\Lambda_0} = -\frac{2\Lambda_0}{l_P^2} \int e^0 \wedge e^1 \wedge e^2 \wedge e^3. \quad (29)$$

Все остальные слагаемые при таком переходе будут содержать дополнительные множители в положительной степени $(l_P/\lambda) \longrightarrow 0$, и потому они опускаются. Здесь λ — характерная длина волн физической подсистемы. Эта ситуация типична при переходе к длинноволновому пределу в любой решеточной теории.

Действие (27)–(29) является действием Гильберта–Эйнштейна, минимально связанным с дираковским полем и записанным в форме Палатини. Оно инвариантно относительно диффеоморфизмов. Этот факт не случаен, так как в (23) сам способ введения координат таков, что уже на этом этапе видна независимость действия от произвола введения координат. Мы говорим “почти произвольно”, так как и диффеоморфизмы — это не произвольные замены координат, а локально взаимно однозначные и дифференцируемые нужное число раз. Важно, что и малые в длинноволновом пределе слагаемые, пропорциональные положительным степеням величины (l_P/λ) , также инвариантны относительно диффеоморфизмов.

Для ясности укажем на тот факт, что на решетке все переменные и константы безразмерны и порядка единицы. В частности, безразмерна константа

$l'_P \sim 1$ в (4) и (8), а также дифференциалы $dx^\mu_{\mathcal{V}_m \mathcal{V}_i}$ в (24). При переходе к размерностным величинам мы полагаем

$$dx^\mu_{\mathcal{V}_m \mathcal{V}_i} = dx^\mu / l_P \sim 1, \quad (30)$$

где дифференциал dx^μ измеряется в сантиметрах и $l_P \sim 10^{-32}$ см. Из (30) видно, что шаг нерегулярной решетки имеет размер порядка l_P . И при этом все слагаемые действия безразмерны, но переменные величины и константы приобретают размерность. Например, в слагаемом (29) космологическая постоянная $\Lambda_0 \sim l_P^{-2}$.

В сигнатуре Минковского PT -симметрия действия определяется формулами (12)–(13), (15) с той лишь разницей, что в этих формулах следует сделать замену $\Psi^\dagger \rightarrow \bar{\Psi}$.

Высокотемпературная PT -симметричная и низкотемпературная несимметричная фазы. Подробное доказательство того факта, что в изучаемой решеточной модели при сверхвысоких температурах реализуется симметричная фаза относительно PT -преобразований, содержится в работе [10]. Там же была дана оценка температуры в точке фазового перехода из симметричной в несимметричную фазу:

$$T_c \sim \frac{\hbar c}{l_P} \sim 10^{18} \text{ ГэВ} \quad \text{или} \quad T_c \sim 10^{31} \text{ К}. \quad (31)$$

Температуру фазового перехода можно оценить также как энергию дираковского подвала, заключенную в планковский объем $V_P \sim l_P^3$: $T_c \sim (\hbar c / l_P^4) l_P^3 \sim \hbar c / l_P$. Эта температура по порядку величины совпадает с температурой Великого Объединения.

Здесь приводятся лишь некоторые необходимые формулы.

Пусть 4D решетка имеет две 3D подрешетки Σ_1 и Σ_2 , которые образуют ее границу. Для простоты мы предполагаем, что между Σ_1 и Σ_2 имеется $N < \infty$ 4D решеточных слоев. По предположению, подрешетки Σ_1 и Σ_2 одинаковы, что в принципе дает возможность вычислить статистическую сумму.

Пусть переменные $\Psi^\dagger_{1\nu}$ и $\Psi_{2\nu}$ определены на Σ_1 и Σ_2 соответственно, и $\Phi_\xi \{ \dots \}$ обозначает голоморфную функцию фермионных переменных либо на Σ_1 , либо на Σ_2 . Для простоты предположим, что все коэффициенты в этих функциях вещественны. Примем следующие обозначения: $\Phi_{1\xi} \equiv \Phi_\xi \{ \Psi^\dagger_{1\nu} \}$, $\Phi^\dagger_{2\xi} \equiv (\Phi_\xi \{ \Psi^\dagger_{2\nu} \})^\dagger = \Phi_\xi \{ \Psi_{2\nu} \}$. Индекс ξ перечисляет независимые ортонормированные функции из их полного набора. Функционал

$$\Phi^\dagger_{2\xi} \exp(\beta \mathfrak{A}) \Phi_{1\xi} \quad (32)$$

должен быть помещен под интеграл (9) и вычислена сумма по ξ . В интеграле (9) на отождествленных между собою 1-симплексах, принадлежащих Σ_1 и Σ_2 , должны быть отождествлены переменные $\{\Omega\}$ и $\{e^a\}$. В (32) параметр $\beta \equiv 1/T \ll 1$ является обратной температурой.

Имеет место следующее.

Утверждение. В некоей конечной окрестности точки $\beta = 0$ свободная энергия статистической суммы (9), за исключением слагаемого вида $(\text{const} \cdot \mathfrak{N} \cdot \beta^{-1} \ln \beta)$, является голоморфной функцией переменной β . Все симметрии действия (3), включая дискретную PT -симметрию, сохранены.

Сформулируем важный вывод из Утверждения.

Поместим под интеграл (9) величину (ср. с (32)) $\Phi^\dagger_{2\xi} \Theta^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \exp(\beta \mathfrak{A}) \Phi_{1\xi}$ и вычислим лишь интеграл по дираковским полям и по переменным $\{e\}$. В работе [10] было показано, что этот интеграл равен нулю при условии справедливости Утверждения. Этот результат записывается как $\langle \Theta^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle_{\Psi, e} = 0$, но для дальнейшего удобнее записать

$$\langle \Theta^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle_{\text{Gauge Fix}} = 0, \quad \langle e^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle_{\text{Gauge Fix}} = 0. \quad (33)$$

Нижний индекс в равенствах (33) указывает на то что полный интеграл (9) вычисляется при (локально) фиксированной калибровке. В противном случае любая калибровочно неинвариантная величина автоматически обращалась бы в ноль под знаком интеграла. Второе равенство в (33) получается тем же путем, что и первое, а также оно является следствием того, что под знаком среднего имеем $\langle e^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle = \langle \Theta^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle$ [15, 16]. Последнее равенство находится в согласии с тем фактом, что независимые величины $e^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2}$ и $\Theta^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2}$ трансформируются одинаково под действием всех симметрий (ср. (1) и (7), (10) и (11), (12) и (15)).

При понижении температуры происходит фазовый переход, суть которого – рождение пространства-времени. Это значит, что появляется ненулевое среднее $\langle e^a_{\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2} \rangle_{\text{Gauge Fix}} \neq 0$, возникает сигнатура Минковского и начинается фаза инфляции. В этой фазе система принципиально описывается действием (27)–(29). Теория гравитации относится к неперенормируемым, в которых квантовые флуктуации нарастают по степенному закону в сторону коротких волн. Тем самым квантовые флуктуации быстро убывают в длинноволновом пределе. Поэтому поле тетрады e^a_μ можно считать “замерзшим” или классическим. Дираковские квантованные поля флуктуируют на фоне классического гравитационного поля.

Сохраняющийся оператор числа фермионных частиц определяется формулой

$$\mathcal{N} = \frac{1}{3!} \varepsilon_{abcd} \int_{\Sigma} (\bar{\Psi} \gamma^a \Psi) e^b \wedge e^c \wedge e^d. \quad (34)$$

Закон сохранения оператора (34) является следствием равенства $\nabla_a \langle \bar{\Psi} \gamma^a \Psi \rangle = 0$, которое выводится непосредственно из функционального интеграла путем малого варьирования переменных $\Psi \rightarrow e^{i\alpha} \Psi$, $\bar{\Psi} \rightarrow e^{-i\alpha} \bar{\Psi}$, $\alpha \rightarrow 0$. Поскольку такие же манипуляции возможны на решетке, то сохранение оператора (34) является точным законом.

Так как $\hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1}(\bar{\Psi} \gamma^a \Psi) \hat{\mathcal{U}}_{PT} = \bar{\Psi} \gamma^a \Psi$ согласно (12), то из (34) имеем

$$\hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \mathcal{N} \hat{\mathcal{U}}_{PT} = -\mathcal{N}. \quad (35)$$

Укажем на фундаментальное отличие подсчета числа фермионных частиц, принятого здесь и используемого в традиционной квантовой теории поля. В последнем случае под числом частиц подразумевается число реальных частиц минус число античастиц, т.е. во внимание принимаются лишь возбуждения над вакуумом. В нашем случае лишь для состояния $|0; \text{False}\rangle$, удовлетворяющего условию $\Psi|0; \text{False}\rangle = 0$ (ложный вакуум на языке традиционной квантовой теории поля), имеем $\mathcal{N}|0; \text{False}\rangle = 0$. Такой подсчет числа фермионов не только возможен в решеточной теории, но и необходим в нашем случае. Для вакуума в традиционной теории поля $|0\rangle$ имеем $\mathcal{N}|0\rangle = N|0\rangle$, где N есть число всех заполненных одночастичных состояний дираковского подвала. В общем случае значение оператора $\mathcal{N}$ будет равно числу всех заполненных состояний одночастично оператора Дирака.

Из уравнения (35) следует, что в высокотемпературной PT -симметричной фазе имеем

$$\langle \mathcal{N} \rangle = 0. \quad (36)$$

Поскольку оператор $\mathcal{N}$ сохраняется, то последнее равенство справедливо во всех фазах.

Мы предполагаем, что в высокотемпературной фазе энтропия S максимальна по переменной $\mathcal{N}$:

$$\partial S / \partial \mathcal{N} = -\beta \mu = 0. \quad (37)$$

Здесь μ обозначает химический потенциал ферми-частиц. Заметим, что равенство (37) не означает, что энтропия находится в своем абсолютном максимуме, поскольку энтропия зависит также от других параметров. Энтропия (растущая со временем) в пространстве де Ситтера представлена в работе [17].

Пусть $|A+\rangle$ – некое квантовое состояние системы, определенное на пространственно подобной гиперповерхности Σ . Введем нормальные координаты x^μ с центром в точке $p \in \Sigma$. В малой окрестности U этой точки нормальные координаты являются почти декартовыми, значения тетрады и связности близки к значениям

$$e_\mu^a \approx \delta_\mu^a, \quad \omega_\mu^{ab} \approx 0. \quad (38)$$

Будем считать, что гиперплоскость $x^0 = 0$ является касательной к гиперповерхности Σ в точке p . Нормальные координаты всегда можно определить таким образом. В окрестности точки p 4-вектор $e_\mu^a dx^\mu$ имеет компоненту $e_\mu^0 dx^\mu > 0$, лишь если $dx^0 > 0$. Заметим, что свойство $e_\mu^0 dx^\mu > 0$ является инвариантом относительно непрерывных преобразований Лоренца (или калибровочной группы) 4-вектора $e_\mu^a dx^\mu$. Триада $e_i^\alpha \sim \delta_i^\alpha$ также не может быть приведена к виду $(-\delta_i^\alpha)$ при помощи непрерывных элементов группы трехмерных вращений. В окрестности точки p дираковский гамильтониан имеет простой вид $\mathcal{H}_\Psi = -i\gamma^0 \gamma^\alpha \partial_\alpha$.

Определим состояние $|A-\rangle$ как

$$|A-\rangle = \hat{\mathcal{U}}_{PT} |A+\rangle. \quad (39)$$

Динамические переменные в.ф. $|A-\rangle$ определены на элементах той же решетки, на которой определены переменные в.ф. $|A+\rangle$, но принимают другие значения. Поскольку в обоих случаях используется одна решетка и координаты привязаны к узлам решетки, то и в случае в.ф. $|A-\rangle$ удобно использовать те же нормальные координаты x^μ . Тогда вместо (38) имеем $e_\mu^a \approx -\delta_\mu^a$, $\omega_\mu^{ab} \approx 0$ в окрестности точки p для в.ф. $|A-\rangle$.

Если $\mathcal{N}|A+\rangle = N_+|A+\rangle$, то согласно (35) и (39)

$$\begin{aligned} \mathcal{N}|A-\rangle &\equiv N_-|A-\rangle = \hat{\mathcal{U}}_{PT}(\hat{\mathcal{U}}_{PT}^{-1} \mathcal{N} \hat{\mathcal{U}}_{PT})|A+\rangle = \\ &= -\hat{\mathcal{U}}_{PT} \mathcal{N} |A+\rangle = -N_+|A-\rangle. \end{aligned}$$

В PT -несимметричной фазе реализуется в.ф.

$$| \rangle = |A+\rangle + |B-\rangle \quad (40)$$

с условиями $\langle A+|A+\rangle = \langle B-|B-\rangle = 1$. Ограничение (36) приводит к следующему соотношению:

$$N_- = -\frac{1 + \langle B-|A+\rangle}{1 + \langle A+|B-\rangle} N_+.$$

Если $\langle A+|B-\rangle = \langle B-|A+\rangle$, то $N_+ = -N_-$.

Для ясности нам необходимо описать состояния $|A\pm\rangle$ при низких температурах в представлении чисел заполнения. Для этого выпишем в окрестности U

в нормальных координатах уравнение для собственных в.ф. одночастичного дираковского гамильтониана: $\mathcal{H}_\Psi \psi_n = \epsilon_n \psi_n$. Обозначим ортонормированные в.ф. $\psi_n^{(+)}$ для $\epsilon_n > 0$ и $\psi_n^{(-)}$ для $\epsilon_n < 0$. Матрица $\gamma^0 \gamma^5$ переводит эти в.ф. друг в друга, так что между $\psi_n^{(+)}$ и $\psi_n^{(-)}$ имеется взаимно однозначное соответствие. Разложим оператор дираковского поля: $\Psi(x) = \sum_n (a_n \psi_n^{(+)}(x) + b_n \psi_n^{(-)}(x))$, где операторы $\{a_n, b_n\}$, а также их сопряженные, являются фермиевскими операторами со стандартными антикоммутационными свойствами. Основное состояние $|0+\rangle$ определяется условиями

$$a_n |0+\rangle = 0, \quad b_n^\dagger |0+\rangle = 0. \quad (41)$$

Рассмотрим трансформацию оператора Ψ под действием антиунитарного оператора $\hat{U}_{PT}$:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{PT}^{-1} \Psi \hat{U}_{PT} &= \sum_n \left[\hat{U}_{PT}^{-1} a_n \hat{U}_{PT} \left(U_{PT} (\bar{\psi}_n^{(+)})^t \right) + \right. \\ &\quad \left. + \hat{U}_{PT}^{-1} b_n \hat{U}_{PT} \left(U_{PT} (\bar{\psi}_n^{(-)})^t \right) \right] = \\ &= \sum_n \left[\hat{U}_{PT}^{-1} a_n \hat{U}_{PT} \psi_n^{(-)} + \hat{U}_{PT}^{-1} b_n \hat{U}_{PT} \psi_n^{(+)} \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь было учтено, что $U_{PT} (\bar{\psi}_n^{(\pm)})^t = \psi_n^\mp$. Последнее равенство проверяется непосредственно. Так как поле (42) имеет те же пространственно-временные трансформационные свойства, что и поле Ψ , то следует сделать вывод:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{PT}^{-1} a_n \hat{U}_{PT} &= b_n, & \hat{U}_{PT}^{-1} b_n \hat{U}_{PT} &= a_n, \\ \hat{U}_{PT}^{-1} a_n^\dagger \hat{U}_{PT} &= b_n^\dagger, & \hat{U}_{PT}^{-1} b_n^\dagger \hat{U}_{PT} &= a_n^\dagger. \end{aligned} \quad (43)$$

Вторая строка получается аналогично. При помощи (41), (43) и определения $|0-\rangle = \hat{U}_{PT} |0+\rangle$, находим:

$$\begin{aligned} a_n^\dagger |0-\rangle &= \hat{U}_{PT} b_n^\dagger |0+\rangle = 0, \\ b_n |0-\rangle &= \hat{U}_{PT} a_n |0+\rangle = 0. \end{aligned} \quad (44)$$

Допуская вольность речи, можно сказать, что состояние $|0+\rangle$ является дираковским вакуумом, а состояние $|0-\rangle$ — антидираковским. Однако энергии этих состояний одинаковы и отрицательны (здесь энергии дираковских морей не вычеркнуты). Кроме того, для любого локального оператора $\hat{O}$ или суммы таковых (например, гамильтониана) имеем

$$\langle 0+ | \hat{O} | 0-\rangle = 0, \quad (45)$$

поскольку

$$\begin{aligned} a_n^\dagger a_n |0+\rangle &= 0, & a_n^\dagger a_n |0-\rangle &= |0-\rangle, \\ b_n^\dagger b_n |0+\rangle &= |0+\rangle, & b_n^\dagger b_n |0-\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Возникновение барионной асимметрии.

Пусть в традиционной квантовой теории поля в пространстве Минковского вакуум вырожден, т.е. имеется несколько вакуумов $|v\rangle$ с различными значениями полей. Тогда в случае $v \neq v'$ имеет место утверждение (ср. с (45)): $\langle v | \hat{O} | v' \rangle = 0$, доказательство которого основано на факте бесконечности пространства [18–20]. В нашей теории равенство (45) возможно также лишь на бесконечной решетке, так как лишь на бесконечных решетках возможен фазовый переход и качественное разделение состояний на состояния вида $|\pm\rangle$. Таким образом, изучать следует физику над одним из вакуумов $|v\rangle$, но не над их суперпозицией.

Изучаемая здесь общая картина качественно сложнее по причине динамичности. В результате фазового перехода из PT -симметричной в несимметричную фазу в.ф. системы приобретает вид (40). Действительно, в интеграле (9) интегрирование по $e_{V_1 V_2}^a$ идет в пределах ($|e_{V_1 V_2}| < 1$), а дираковские переменные взаимно заменяемы согласно (12). Поскольку появляется ненулевой параметр порядка e_μ^a ($e_\mu^a \sim \delta_\mu^a$ в состоянии $|A+\rangle$ и $e_\mu^a \sim -\delta_\mu^a$ в состоянии $|B-\rangle$), то появляется время $dt = e_\mu^0 dx^\mu$. В этих состояниях время течет разнонаправленно. В течение первоначального кванта времени t_P имеет место взаимодействие между указанными состояниями, так что число фермионов $N_+ = -N_-$ может измениться. Но по прошествии времени t_P любое взаимодействие между состояниями $|A+\rangle$ и $|B-\rangle$ прекращается, и накопившееся значение N_+ сохраняется (ср. с примером из Введения). Это значение N_+ сохраняется, не являясь, вообще говоря, равновесным значением $N_+^{(0)}$ при любой температуре и нулевом значении химического потенциала μ . Этот эффект здесь мы называем явлением барионной асимметрии. Заметим, что в состоянии $|0+\rangle$ (41) реализуется $N_+^{(0)}$ при нулевой температуре.

Приведем простейшую иллюстрацию к определению числа $N_+^{(0)}$ на примере идеального ферми-газа, состоящего из двух степеней свободы с энергиями $\epsilon = \pm \epsilon$ и нулевым химическим потенциалом. Равновесное число частиц на уровне ϵ равно $n(\epsilon) = (e^{\beta \epsilon} + 1)^{-1}$. Полное число частиц $N^{(0)} = n(-\epsilon) + n(\epsilon) = 1$ при любой температуре. Иными словами, число возбуждений (электронов) $n(\epsilon)$ равно числу дырок (позитронов) $1 - n(-\epsilon)$. В случае $\beta \rightarrow 0$ имеем $n(-\epsilon) \rightarrow (1/2 + 0)$, $n(\epsilon) \rightarrow (1/2 - 0)$, или $\langle \epsilon \rangle \rightarrow 0$. $N^{(0)}$ является аналогом $N_+^{(0)}$.

Нашей целью является оценка, хотя бы качественная, величины $\delta N_+ \equiv N_+ - N_+^{(0)}$. Величина $\delta N_+ \neq 0$ может возникнуть в результате термодина-

мической либо квантовой флуктуации. Чтобы флуктуацию можно было рассматривать как термодинамическую, должно пройти время τ [21]

$$\tau \gg \frac{\hbar}{T}. \quad (47)$$

Здесь температура близка к температуре фазового перехода $T_c \sim \hbar c/l_P$ (31). Тогда при помощи (47) получаем оценку: $\tau \gg l_P/c \sim t_P$. Далее приводятся аргументы в пользу того, что равенство (45) уже имеет место при $\tau \geq t_P$, хотя это предположение скорее является гипотезой. Поэтому механизм термодинамических флуктуаций здесь не работает. Проблема термодинамических флуктуаций в вакууме пространства де Ситтера изучалась в обзоре [22], где были получены интересные результаты.

Мы предполагаем, что здесь происходит фазовый переход первого рода. Основанием для этого предположения является следующий факт: в несимметричной фазе $N_+ = -N_- \neq 0$, и при этом флуктуации числа N_+ заканчиваются в течение первого кванта времени t_P (см. ниже). Это означает, что ненулевые число N_+ возникает практически мгновенно в результате фазового перехода. В процессе фазового перехода первого рода образуются локальные зародыши аида $|\Xi\rangle = |\Xi+\rangle + |\Xi-\rangle$ (ср. с (40)). По предположению, в.ф. $|\Xi\rangle$ зависит от переменных, определенных на нескольких сопредельных элементах решетки. Число таких переменных имеет порядок 10^n , $n \sim 1$. В рамках этого предположения полная в.ф. системы приближенно представляется в виде

$$|\rangle \approx \prod_{\Xi} |\Xi\rangle. \quad (48)$$

Для оценки величины δN_+ как результата квантовых флуктуаций мы будем пользоваться формулами

$$|\delta E_{\Xi+} \delta N_{\Xi+}| \sim \hbar |\dot{N}_{\Xi+}|, \quad |\delta E_{\Xi+}| t_P \sim \hbar, \quad (49)$$

$$\delta N_+ \approx \sum_{\Xi} \delta N_{\Xi+} \longrightarrow |\delta N_+| \sim \sqrt{N_+} |\delta N_{\Xi+}|. \quad (50)$$

Последнее соотношение в (50) следует из того факта, что знак каждой флуктуации $\delta N_{\Xi+}$ случаен и порядок величины всех этих флуктуаций одинаков. Здесь $E_{\Xi+}$ и $N_{\Xi+}$ обозначают фермионный вклад в энергию и число частиц состояния $|\Xi\rangle$. Далее, $|\dot{N}_{\Xi+}| \sim \nu |N_{\Xi+}|/t_P$, $\nu \ll 1$. Малость параметра ν означает, что в течение первого кванта времени t_P величина числа $N_{\Xi+}$ изменяется незначительно. Комбинируя последние оценки и соотношения (49), (50), находим:

$$|\delta N_+| \sim \nu \sqrt{N_+} N_{\Xi+} \sim \nu \sqrt{N_+}, \quad (51)$$

поскольку в данной задаче можно положить $N_{\Xi+} \sim 1$.

Здесь видна принципиальная разница роли рода фазового перехода в традиционной теории бариосинтеза [1, 3] и при нашем подходе. В первом случае первый род гарантирует появление зародышей и пузырей с нарушенной симметрией, двигающиеся доменные стенки которых стимулируют бариосинтез. В нашей теории переход первого рода приводит к формуле факторизации (48) и затем к последующим формулам (49)–(51).

Чтобы оценить величину ν , необходимо оценить амплитуду перехода одного фермиона из состояния $|\Xi+\rangle$ в состояние $|\Xi-\rangle$ в течение минимального кванта времени. В решеточной теории это подразумевает вычисление величины

$$\nu \sim \left| \langle \Xi- | \mathfrak{A}_{\Psi}^{(1)} | \Xi+ \rangle \right|^2, \quad (52)$$

где $\mathfrak{A}_{\Psi}^{(1)}$ обозначает часть фермионного действия (5), определенную на пространственно подобном подкомплексе толщиной в один слой в направлении времени. В правой части в (52) выделяется та часть амплитуды, которая увеличивает (уменьшает) число частиц в состоянии $|\Xi+\rangle$. Заметим, что вследствие высокой температуры состояния $|\Xi+\rangle$ и $|\Xi-\rangle$ являются суперпозицией состояний с разными числами $N_{\Xi+}$ и $N_{\Xi-}$, но с условием $N_+ + N_- = 0$.

Имеется два источника малости величины (52): 1) малость величины $\Theta_{\nu_1 \nu_2}^a$ вблизи точки фазового перехода (см. (33)); 2) начало процесса выстраивания дираковского вакуума в состоянии $|\Xi+\rangle$ и “анти-дираковского вакуума” в состоянии $N_{\Xi-}$. В конце этого процесса мы имеем строгое равенство (45), но уже и в самом начале этот фактор играет определяющую роль. Другой источник малости параметра ν – это интеграл перекрытия при интегрировании по переменным e^a . К сожалению, мы не в состоянии дать достоверную оценку величины ν , ограничиваясь лишь констатацией факта $\nu \ll 1$.

Приведем числовую оценку и сравним ее с наблюдениями. Оценим число N_+ по современному состоянию видимой части Вселенной: $N_+ \sim (L_0/l_P)^3 \sim 10^{181}$. Здесь $L_0 \sim 2 \cdot 10^{28}$ см есть размер видимой части Вселенной и $l_P \sim 10^{-32}$ см – планковский масштаб. Тогда согласно (52) для плотности фермионной асимметрии

$$\delta n_+ \equiv \nu \sqrt{N_+}/L_0^3 \sim \nu (L_0 l_P)^{-3/2} \sim \nu \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}. \quad (53)$$

Экспериментальное значение $\delta n_{+(\text{exp})} \sim 10^{-5} \text{ см}^{-3}$. Отсюда видно, что, если $\nu \sim 10^{-10}$, то описанный

механизм нарушения фермионной симметрии работает.

Заключение. Здесь изложена лишь идея возникновения асимметрии частицы–античастицы на самом раннем этапе существования Вселенной, предшествующем фазе инфляции. Описанный сценарий реализуется в дискретной (решеточной) теории гравитации.

Необходимо сравнить условия Сахарова для бариогенезиса с теми условиями, которые имеют место в изучаемой модели. Выпишем условия Сахарова: 1) нарушение сохранения барионного заряда; 2) нарушение C - и CP -инвариантности; 3) отсутствие теплового равновесия на стадии процессов с несохранением барионного заряда. Третье условие здесь выполнено автоматически. Далее, в рассматриваемой модели не выделены барионы и лептоны. Поэтому здесь рассматривается нарушение фермионного заряда. Полный фермионный заряд сохраняется, но перераспределяется между состояниями $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Каждое из этих состояний по отдельности не является C -четным, и их взаимодействие прекращается в течение времени порядка t_P . В такой интерпретации здесь содержатся первые два условия Сахарова.

По мнению автора, полученный результат может стимулировать поиск более совершенного варианта дискретной теории гравитации, лучше подходящего для некоторых вычислений.

Эта работа выполнена по Государственной Программе 0033-2019-0005.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института теоретической физики им. Л. Д. Ландау. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. V. A. Rubakov and M. E. Shaposhnikov, Phys.-Uspekhi **39**, 461 (1996).
2. S. N. Vergeles, N. N. Nikolaev, Y. N. Obukhov, A. Y. Silenko, and O. V. Teryaev, Uspekhi Fizicheskikh Nauk **193**, 113 (2023).
3. V. A. Kuzmin, V. A. Rubakov, and M. E. Shaposhnikov, Phys. Lett. B **155**, 36 (1985).
4. S. Vergeles, Nuclear Physics B **735**, 172 (2006).
5. S. Vergeles, Phys. Rev. D **92**, 025053 (2015).
6. S. Vergeles, J. High Energy Phys. **2017**, 1 (2017).
7. S. Vergeles, Phys. Rev. D **96**, 054512 (2017).
8. S. Vergeles, Clas. Quan. Grav. **38**, 085022 (2021).
9. S. Vergeles, Clas. Quant. Grav. **39**, 038001 (2021).
10. S. Vergeles, arXiv preprint arXiv:2301.01692 (2023).
11. H. Davoudiasl, R. Kitano, G. D. Kribs, H. Murayama, and P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **93**, 201301 (2004).
12. E. Arbuzova, A. Dolgov, K. Dutta, and R. Rangarajan, Symmetry **15**, 404 (2023).
13. S. S. Mishra, S. Mandal, and P. Sahoo, Phys. Lett. B **842**, 137959 (2023).
14. Л. Понтрягин, *Основные комбинаторной топологии*, Наука, М. (1976).
15. A. A. Vladimirov and D. Diakonov, Phys. Rev. D **86**, 104019 (2012).
16. G. Volovik, JETP **132**, 727 (2021).
17. G. Volovik, JETP Lett. **119**(7), 564 (2024).
18. S. Weinberg, *The quantum theory of fields*, Cambridge university press (1995), v. 2.
19. G. E. Volovik, *Quantum Phase Transitions from Topology in Momentum Space*, Lect. Notes Phys. **718**, 31 (2007).
20. Ya. G. Sinai, Pergamon Press, Oxford (1983), v. 108.
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976), ч. 1.
22. G. E. Volovik, Symmetry **16**, 763 (2024).

Ускорение электронов при воздействии тераваттного фемтосекундного лазерного излучения на кластеры азота

М. М. Назаров⁺¹⁾, Т. А. Семенов⁺, А. А. Таусенев^{+,*}, М. В. Чащин⁺, П. А. Щеглов⁺, А. В. Лазарев^{*},
Д. А. Сидоров-Бирюков^{+,*×}, А. В. Митрофанов^{+,*×}, В. М. Гордиенко^{+,*}, В. Я. Панченко^{+,*}

⁺ Федеральное государственное бюджетное учреждение “Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,
123182 Москва, Россия

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

[×] Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 июня 2024 г.

После переработки 27 августа 2024 г.

Принята к публикации 4 сентября 2024 г.

Экспериментально продемонстрирована возможность получения узконаправленного высокоэнергетического электронного пучка, получаемого при взаимодействии тераваттного излучения Ti:Sa лазерного комплекса с азотной газо-кластерной струей при давлении газа, соответствующем границе области конденсации. Получен колимированный электронный пучок с энергией до 10 МэВ и расходимостью ~ 10 мрад при концентрации плазмы $\sim 10^{19}$ см⁻³. Показано, что применение азота существенно улучшает пространственные (расходимость) и энергетические (заряд и форма спектра) свойства генерируемого пучка электронов по сравнению с аргонном и криптоном. Выполнен термодинамический анализ образования и состава, формируемых в сверхзвуковой струе кластеров.

DOI: 10.31857/S0370274X24100028, EDN: UWTFOY

1. Введение. В настоящее время активно ведутся исследования, направленные на создание источников лазерно-ускоренных электронов [1]. Пучки электронов с энергией в десятки и более МэВ [1–3], генерируемые тераваттными лазерными системами, востребованы для генерации гамма-квантов [1, 3], пучков ионов [4] и нейтронов [5, 6]. Наиболее распространенным является способ лазерного кильватерного ускорения (LWFA), который предполагает использование излучения сфокусированного мощного фемтосекундного лазера в газе низкой плотности. Недавно был предложен метод ускорения электронов, инжектируемых в нелинейную плазменную волну, генерируемую в газо-кластерных струях [7–10], в которых образующиеся при расширении газа в вакуум кластеры представляют собой частицы нанометрового размера. Для оценки размеров кластеров обычно ограничиваются теорией Хагены, применимой в газовой фазе [11–14]. Было показано, что присутствие наночастиц увеличивает плотность заряда. Таким образом, наличие наночастиц, к семейству которых относятся и атомно-молекулярные кластеры [11, 15, 16], может привести к возникновению нового механизма инжекции, повышающему заряд и энер-

гию электронов в пучке. Преимущество в использовании газо-кластерных струй определяется низким порогом для самофокусировки лазерного излучения, более эффективным нагревом мишени, обеспечивающим высокую электронную температуру формирующейся плазмы, возможностью управления размерами кластеров перестройкой давления. Переход от использования в качестве лазерных мишеней струй “легких” газов (водород, гелий) к “тяжелым” (азот, аргон, криптон) связан со стремлением к увеличению заряда пучка ускоренных электронов за счет наращивания плотности плазмы [12, 17].

Характерный заряд электронного пучка, генерируемого в газовых мишенях, составляет 10–100 пКл, при расходимости 5–10 мрад [18–20]. При использовании кластерных мишеней заряд может возрастать до единиц нКл, но расходимость увеличивается до 10–100 мрад [12, 13, 17]. Поэтому задача нахождения условий, при которых одновременно достигается высокий заряд и малая расходимость пучка электронов для воздействующего лазерного импульса с энергией в сотни мДж становится актуальной. Достигнутые к настоящему времени эффективности по заряду электронного пучка составляют около 0.2 пКл/Дж для газовых [18–21] и 1 пКл/Дж – для кластерных мишеней [12, 13, 17]. При учете угловой расходимо-

¹⁾ e-mail: nazarovmax@mail.ru

сти и спектральной ширины, характерная “яркость” электронного пучка составляет 10^{-3} пКл/МэВ/мрад [18, 20]. Рабочим газом в данной работе выбран азот, как один из нескольких перспективных газов для лазерного ускорения электронов, он часто используется как малая добавка к гелию [10, 22], реже в чистом виде в газовых мишенях [20, 21, 23], а при использовании газо-кластерных струй [11, 12, 14, 24] мало исследован.

Предметом настоящего письма является экспериментальная демонстрация возможности получения электронного пучка с высокими зарядом и направленностью при взаимодействии излучения тераваттного Ti:Sa лазера с кластерами азота и определение влияния пограничного состояния конденсации азота на процесс ускорения.

2. Формирование агрегатов азота в расширяющейся сверхзвуковой струе. В данной работе при выборе условий эксперимента впервые использован подход, позволяющий формировать в зоне взаимодействия газо-кластерной струи с лазерным пучком (вблизи среза сопла) агрегаты с заданными свойствами (кластеры, нанокაпли, кристаллы). Была использована квазиодномерная газодинамическая модель сверхзвукового течения реального газа в коническом сопле [25], позволяющая рассчитать температуры азота вблизи среза сопла при разных начальных давлениях P_0 и температурах T_0 . В процессе расширения (движение газа вдоль оси сопла по координате z) изображающая точка движется вдоль определенной изэнтропы, заданной начальным давлением, до выхода из сопла ($z = 10$ мм). Анализ поведения изэнтроп на (P, T) -диаграмме состояния азота (рис. 1) показывает, что при давлениях, превышающих 30 бар в месте лазерного воздействия начнет эффективно формироваться жидкий конденсат. При меньших давлениях, когда изображающая точка не подходит к кривой испарения, азот будет оставаться в газовой фазе с присущими ей низкими концентрациями кластеров малых размеров.

Вычисления выполнены для уравнения состояния Редлиха–Квонга [26], значение теплоемкости бралось из данных NIST [27]. Рассчитанные на основе модели значения температур на срезе сопла (черная штрихованная линия на (P, T) диаграмме азота (см. рис. 1) и анализ поведения соответствующих изэнтроп позволяет получить качественные данные о составе струи и условиях зарождения кластеров. Для оценки размеров кластеров выполнены также расчеты по теории Хагены [14] с параметром $\kappa = 528$ для азота. Расчеты ориентированы на использование конического сопла с малым углом раствора $2\alpha = 10^\circ$ (крити-

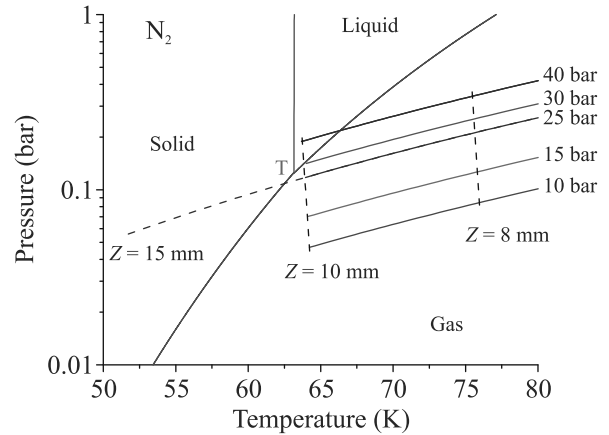


Рис. 1. (Цветной онлайн) (P, T) -диаграмма состояния азота с изэнтропами расширения

ческое сечение $d_{\text{ср}} = 700$ мкм, длина $Z_s = 10$ мм). Оценки показывают, что при условиях до начала конденсации ($10 < P_0 < 30$ бар, $T_0 = 298$ К) средние радиусы кластеров должны изменяться в диапазоне 3–8 нм. Особенность резкого появления кластеров вблизи кривой испарения должна проявиться не только в выходе электронов, но и выходе рентгеновского излучения. Такое предположение подтверждается исследованиями ускорения электронов в газо-кластерной струе водорода [28].

3. Методика измерений. Схема эксперимента представлена на рис. 2. Использовалось излучение мульти-тераваттного Ti:Sa лазерного комплекса НИЦ “Курчатовский институт” ($\lambda_0 = 800$ нм, длительность импульсов $\tau = 30$ фс, при частоте повторения 10 Гц) [29, 30]. Наносекундный контраст импульсов составлял 10^8 , а пикосекундный – 10^7 [31]. Оптические импульсы с энергией $E \leq 160$ мДж заводились в камеру взаимодействия, давление в которой поддерживалось на уровне 10^{-2} мбар. Фокусировка осуществлялась внеосевым параболическим зеркалом с фокусным расстоянием 18 см ($F/4$) в пятно диаметром 8 мкм, что обеспечивало релятивистскую лазерную интенсивность $I \leq 5 \times 10^{18}$ Вт/см². Длина перетяжки в вакууме составила $L_R \sim 200$ мкм. Кластерная мишень формировалась в коническом сопле, описанном в разделе 2. Клапан сопла открывался синхронно с лазерным импульсом на 1 мс. Ускоренные электроны регистрировались на сцинтилляторе, защищенном от засветок алюминиевой фольгой толщиной 10 мкм, область свечения передавалась широкоапертурным объективом на ПЗС-камеру CCD-1. Анализируемым сигналом являлась яркость кадра в области 200×200 мрад², захватывающей заведомо весь пучок, пропорциональная суммарному выходу электронов, то есть полному заряду их пакета. Для

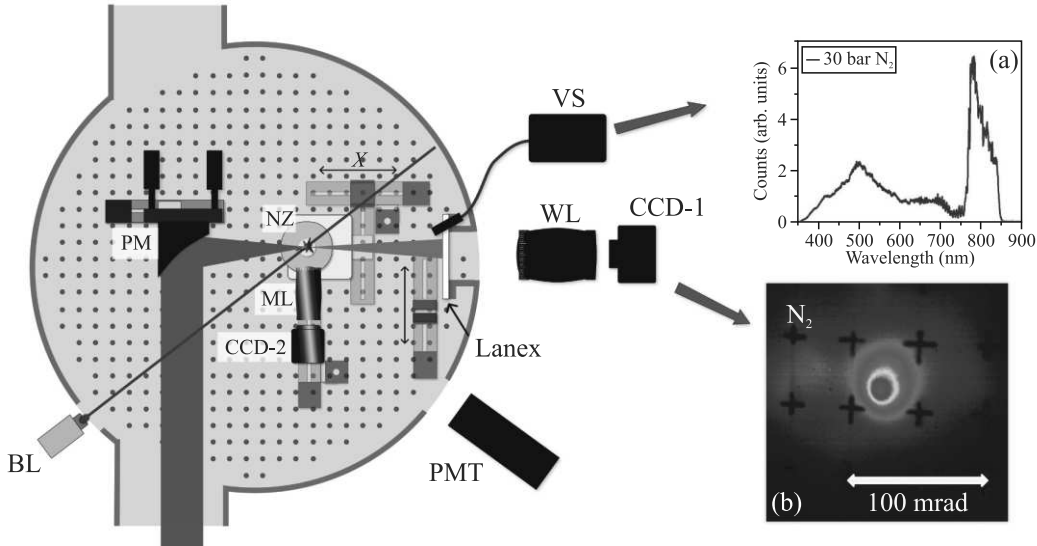


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема эксперимента. PM – внеосевое параболическое зеркало; ML – макрообъектив; WL – фотообъектив; NZ – сопло с клапаном; PMT рентгеновский ФЭУ; BL – синий лазер для наблюдения рэлеевского рассеяния; VS и CCD – спектрометр и ПЗС видимого диапазона. Вставка (а) – спектр видимого диапазона рассеянного излучения Ti:Sa лазера. Вставка (б) – изображение пучка электронов, регистрируемое на CCD-1

Таблица 1. Характеристики газ-кластерных сред (начальное давление $P_0 = 30$ бар, температура $T_0 = 298$ K)

Параметр/газ	N ₂	Ar	Kr
Атомный номер	7	18	36
Кратность ионизации при $I = 2 \times 10^{18}$ Вт/см ²	5+	8+	15+
Концентрация электронов в центре мишени n_e , см ⁻³	0.5×10^{20}	1×10^{20}	2.6×10^{20}
Средний радиус кластеров, R_{cl} , нм	6.8	20	25
Предельная концентрация кластеров, n_{cl} см ⁻³	30×10^{13}	1.3×10^{13}	1×10^{13}

определения энергетического спектра электронов в выходящий луч вдвигался магнитный спектрометр с величинами поля 0.1 и 0.15 Тл и длиной магнита 2 см, данные двух измерений объединялись в итоговый спектр в диапазоне 0.3–10 МэВ [30]. Кластеризация в струе контролировалась по величине рэлеевского рассеяния (см. рис. 3) от непрерывного лазерного излучения ($\lambda_P = 430$ нм). Изображение области рассеяния, а также форма плазменного филамента фиксировалась ПЗС камерой CCD-2 с макрообъективом и сменными нейтральными фильтрами в видимом диапазоне. Спектральные характеристики прошедшего мишень лазерного излучения регистрировались волоконным спектрометром. Также регистрировалось рентгеновское излучение [29]. Экспериментальные исследования проводились в азоте, аргоне и криптоне при одинаковых условиях. Характеристики газов приведены в табл. 1.

4. Результаты и обсуждение. Диагностика формирования кластеров азота проводилась с помощью регистрации рэлеевского рассеяния. Сигнал рассеяния S_R связан с концентрацией кластеров n_{cl}

и средним радиусом кластера R_{cl} как $S_R \sim n_{cl} R_{cl}^6$ [26]. По распределению яркости в области рассеяния определялось распределение кластеров в струе азота (см. зеленую кривую на рис. 3). Вследствие слабой кластеризации в газовой фазе зарегистрировать рассеяние в азоте при $P_0 < 30$ бар не удалось. Отметим, что при давлении $P_0 = 40$ бар, и температуре $T_0 = 298$ K, сигнал рассеяния в струе азота на 3 порядка слабее, чем в аргоне и криптоне. Из отношения сигналов рассеяния и из размера кластера аргона ($R_{clAr} \approx 25$ нм), определенного ранее [26], оценивался размер кластеров азота $R_{clN_2} \approx 8$ нм в предположении близких величин n_{cl} . Приведенная оценка согласуется с теорией Хагены.

Заряд электронного пучка увеличивается при приближении лазерного излучения к срезу сопла по оси z на расстояние 0.5 мм, а по оси x оптимум фокусировки находится на переднем краю кластерной струи (примерно в $x = -1.2$ мм от оси сопла, см. рис. 3). Поскольку длина перетяжки (200 мкм) соизмерима с масштабом изменения концентрации кластеров в короткофокусной геометрии, сдвиг лазерного

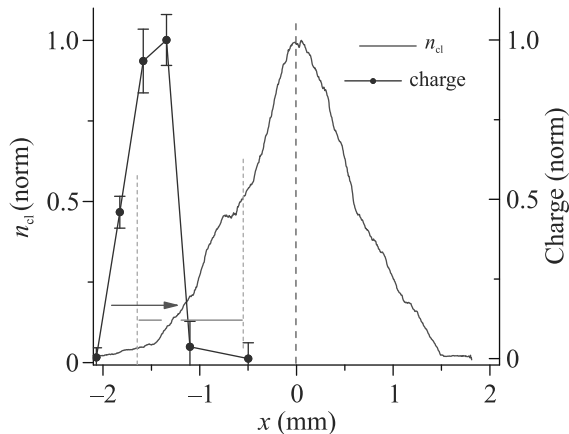


Рис. 3. (Цветной онлайн) Профиль рассеяния в кластерной струе азота при давлении 40 бар. Оранжевый отрезок обозначает начало и окончание наблюдаемого филамента. Синие кружки – заряд электронов при смещении вакуумной перетяжки в данную точку x . Красная стрелка – положение вакуумной перетяжки в оптимальном случае

фокуса на 200 мкм меняет длину и форму плазменного канала, что существенно влияет на выход электронов. До достижения лазерным импульсом области фокусировки с высокой концентрацией кластеров нужно предотвратить потери энергии на нагрев плазмы в фронтальном объеме мишени. Оптимальная точка фокусировки находится на входе в образующий плазменный канал, это определяется компромиссом между плотностью вещества в перетяжке, плазменной дефокусировкой и интенсивностью.

Пороговая мощность лазерного излучения, требуемая для наступления релятивистской самофокусировки, оценивается формулой $P_{las_cr} = 17.4(n_{cr}/n_e)$ ГВт [1, 18], где n_{cr} – критическая концентрация плазмы (для $\lambda = 0.8$ мкм $n_{cr} \approx 1.7 \times 10^{21}$ см $^{-3}$). Для $n_e = 2 \times 10^{19}$ см $^{-3}$ и используемой лазерной мощности $P_{las} = 5$ ТВт превышение над критическим уровнем мощности в нашей работе составляет $P_{las}/P_{las_cr} = 2$, это согласуется с границей появления канала при $P_0 > 20$ бар, данными по n_e, n_{at} из табл. 1 и на рис. 4. Протяженность плазменного канала составляет порядка 0.7 мм для всех трех газов, рис. 5. Длина и положение плазменного канала определяется в первую очередь распределением концентрации электронов и соответствующей самофокусировкой основного импульса, что видно в Томсоновском рассеянии (свечении канала) – рис. 4 и 5. При равных давлениях до клапана свечение канала в газо-кластерной струе азота было на порядок слабее, чем в криптоне, что подтверждает данные об относительных величинах n_e из табл. 1.

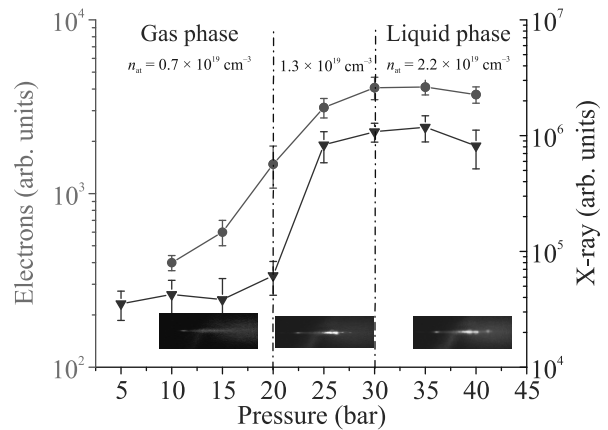


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости заряда пучка электронов и энергии рентгеновского импульса от давления азота P_0 . На вставках свечение филамента и концентрация атомов при давлениях 15, 25 и 40 бар

В области лазерной перетяжки наблюдался темный участок, разрывающий канал (оранжевый отрезок на рис. 3 и верхняя панель на рис. 5), связанный с разрушением кластеров предимпульсом [32–34]. Интенсивность предимпульса $I \approx 10^{12}$ Вт/см 2 [31] достаточна для кулоновского разлета кластеров [35]. При этом время разлета составляет ≈ 10 пс [15]. Предимпульс не испытывает релятивистской самофокусировки, следовательно, не может разрушать кластеры за пределами лазерной перетяжки. Таким образом в областях, где наблюдается свечение плазменного канала, кластеры сохраняются до прихода основного импульса. Темную область можно смещать вдоль канала с помощью фокусировки лазера в определенное положение x . Из зависимости выхода электронов от x (на рис. 3) можно оценить вклад кластеризованной фазы азота в процесс ускорения. При максимальном выходе электронов ($x = -1.3$ мм) перетяжка и область разрушения кластеров находятся на переднем крае канала и занимают малую его часть ($x = -1.4$ – -1.2 , см. рис. 5 верхний слева), плазменный канал располагается ближе к центру струи и имеет в несколько раз большую протяженность ($x = -1.2$ – -0.5). Если же область разрушения кластеров вдвинуть в середину канала ($x = -1$), выход электронов существенно падает (см. точку $x = -1$ на синей кривой на рис. 3). При том, что концентрация вещества в объеме взаимодействия еще не падает существенно к моменту прихода основного импульса. Это показывает преимущество именно кластерного состояния мишени для процесса ускорения.

На основании анализа, проведенного в разделе 2, исследовалось влияние появления кластеров азота (задаваемое P_0) на процесс ускорения электро-

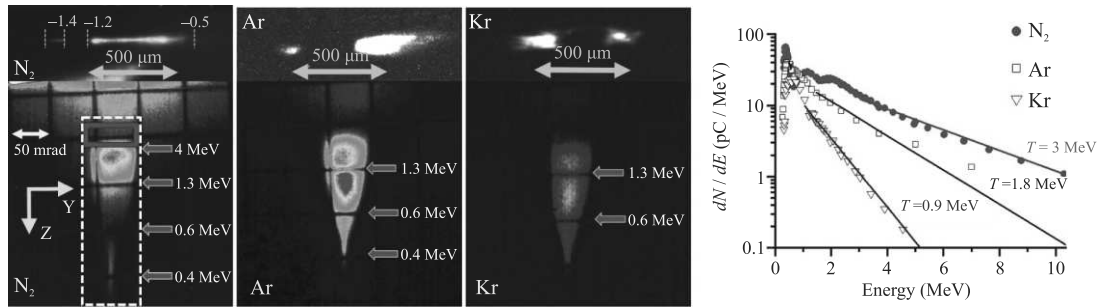


Рис. 5. (Цветной онлайн) Верхний ряд – изображение лазерно-плазменного свечения в области перетяжки в азоте (слева), аргоне (по центру), криптоне (справа), при давлении $P_0 = 30$ бар, пунктирные линии для N_2 отмечают границы канала, его разрыва и значение координаты x . Нижний ряд – энергетически-угловой спектр электронов при магнитном поле $B_y = 0.1$ Тл. Входная апертура спектрометра обозначена красным прямоугольником, область оцифровки сигнала – белым прямоугольником. Зеленые стрелки указывают расчетную энергию электронов для смещений с шагом сетки 1 см. Справа на графике приведены восстановленные энергетические спектры электронов. Экспериментальные точки отмечены кружками (азот), квадратами (аргон), треугольниками (криптон). Линии соответствуют экспоненциальной аппроксимации с температурой 0.9 МэВ (синяя кривая), 1.8 МэВ (черная) и 3 МэВ (красная)

нов. При малой концентрации и размерах кластеров в азоте не образовывался плазменный канал (см. вставку для 15 бар на рис. 4). При увеличении давления $P_0 > 20$ бар канал становился протяженным и узким, при этом наблюдался существенный рост заряда пучка электронов (см. рис. 4), сопровождающийся резким увеличением выхода рентгеновского излучения, указывающий на появление кластеров в струе [36]. Действительно, вследствие наличия твердотельной локальной плотности кластеры гораздо эффективнее газа нагреваются в сверхсильных световых полях [11], что приводит к излучению жестких тормозных фотонов с энергией несколько кэВ [29, 37, 38]. Обнаружено, что изменение давления в области перехода газ–жидкость с $P_0 = 10$ –20 бар на $P_0 = 30$ бар приводит к росту в ≈ 7 раз заряда пучка ускоренных электронов и ≈ 30 раз выхода рентгеновских фотонов (см. рис. 4). Мы связываем резкое увеличение выхода жесткого рентгеновского излучения с активной кластеризацией в области фазового перехода ($P_0 = 20$ –30 бар), где протекает зарождение кластеров для перехода в жидкую фазу. Создание же жидкой фазы (увеличение давления > 30 бар) не обеспечивает ни дальнейшего роста заряда электронов, ни повышения выхода рентгеновских фотонов. При этом форма и яркость создаваемого плазменного канала перестает меняться для давлений > 25 бар, см вставки на рис. 4.

Оценим концентрацию плазмы в оптимальном случае. Согласно теории Хагены среднее количество атомов в кластере [14] составляло $N_{cl} = 3 \times 10^4$. Из концентрации атомов азота $n_{at} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, вычисленной для области фазового перехода ($P_0 = 30$ бар, $T_0 = 298 \text{ K}$), получаем оценку предельной концен-

трации кластеров $n_{cl} = n_{at}/N_{cl} \approx 3 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Принимая во внимание, что лазерное воздействие производится на фронте струи, где плотность кластеров составляет примерно 20 % от максимальной (см. рис. 3), в лазерном филаменте останется $n_{cl} \approx 7 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Средняя концентрация плазмы, возникающая при ионизации кластеров до $Z = +5$, будет соответствовать $n_e \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Уширение спектра видимого диапазона (вставка на рис. 2) свидетельствует об изменяющейся во времени концентрации электронов плазмы и показателе преломления [39, 40]. Из этого уширения можно независимым способом оценить концентрацию плазмы [41], величина которой ($n_e = 0.16 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$) не противоречит рассчитанной выше.

$$n_i = -\frac{8\pi^2 \varepsilon_0 m_e c^3 \Delta\lambda dt}{e^2 \lambda_0^3 L dZ}, \quad (1)$$

где

$$n_e = n_i \cdot Z, \quad (2)$$

n_i – концентрация ионов, $\Delta\lambda$ – величина синего уширения видимого спектра ($\sim 400 \text{ нм}$), m_e , e – масса и заряд электрона, $dZ = 5$, $dt \approx \tau = 30 \text{ фс}$, $L = 650 \text{ мкм}$ – длина взаимодействия.

Оценим заряд пучка. Для изображения электронного пучка на рис. 2, суммарный сигнал на ПЗС камере Gentec Beamage 4M составил 3×10^8 отсчетов (при сборе с экрана в телесный угол 0.1 ср), при этом полезный сигнал до экрана имеет расходимость $\sim 10 \text{ мрад}$ по осям Y и Z ; 50 % яркости кадра содержится в пределах $\pm 10 \text{ мрад}$ от оси пучка. При фактической чувствительности $0.26 \text{ отсчет/фотон}$, используя литературную калибровку экрана Kodak

Lanex Regular, 7×10^9 фот/ср/пКл [42], получаем полный заряд порядка 100 пКл, из них 50 пКл в коллимированной части пучка электронов.

Энергетический спектр электронов восстанавливался по отклонению в магнитном поле $B_y = 0.1$ Тл в направлении оси Z на рис. 5. Анализировалась просуммированная в направлении Y яркость в зависимости от Z в области белого прямоугольника. Артефактное отклонение в направлении Y (квадрупольная фокусировка) вызвано малыми полями $B_z \sim 2$ мТл, оно не превышает апертуры детектора (50 мрад) и нивелируется суммированием в направлении Y . Детали вычисления энергетического спектра приведены в работе [30]. Для азота получен спектр с четко выделенным максимумом на 0.4 МэВ, за ним локальным минимумом и экспоненциально спадающим “хвостом” до 10 МэВ (см. рис. 5). Анализ формы спектра показывает, что 80 % заряда, что соответствует 40 пКл, находится в коллимированном пучке релятивистских электронов с энергией более 1 МэВ. Полученная оценка соответствует мировому уровню эффективности генерации заряда ~ 0.3 нКл/Дж для тераваттных лазерных систем. При этом спектральная плотность заряда имеет порядок 10 пКл/МэВ, а с учетом угловой расходимости ~ 1 пКл/МэВ/мрад.

Выделяют два механизма ускорения электронов для газо-кластерных мишеней: DLA – прямое лазерное ускорение [17, 32, 33], при котором характерен широкий, экспоненциально спадающий спектр распределения по энергиям, расходимость пучка ~ 100 мрад, концентрация плазмы $10^{19} < n_e < 10^{21}$ см $^{-3}$ и автомодулированное ускорение в поле кильватерной волны (SM-LWFA), концентрация плазмы при этом n_e ограничена величиной порядка 10^{18} – 10^{19} см $^{-3}$ [12, 13, 18, 34]. Во втором случае возможно моноэнергетическое ускорение электронов, а расходимость пучка ~ 10 мрад, заряд становится меньше по сравнению с режимом DLA. На основании сопоставления электронных спектров и расходимости пучка с данными работ [43, 44] можно ожидать, что для кластеров азота реализуется гибридный режим с двумя механизмами ускорения: SM-LWFA и DLA. В больших кластерах Ar и Kr ($R_{cl} = 20$ и 25 нм соответственно [26]) при этой же геометрии доминирует DLA механизм с большой (100 мрад) расходимостью пучка и меньшими зарядом и энергией электронов. Заряд электронного пучка для случая азота оказался наибольшим (в 1.3 раза больше, чем в кластерах аргона и в 4 раза больше, чем в кластерах криптона). Сравнение газов показывает, что увеличение плотности плазмы и наращива-

ние размеров кластеров не приводят к улучшению ни заряда, ни энергии, ни расходимости пучка электронов. Мы считаем, что данный результат обусловлен тем, что именно свойства границы области конденсации в азоте позволяют формировать кластеры оптимальных размеров при достаточной их концентрации для инжекции электронов в ускоряющую волну. Действительно, оценки на основании работы [45] показывают, что для кластеров азота с $R_{cl} = 7$ нм наступает предел кулоновского взрыва, т.е. полного вылета электронов из кластера за время действия лазерного импульса.

5. Заключение. В результате проведенных исследований экспериментально продемонстрирована возможность эффективной генерации коллимированного электронного пучка с расходимостью ~ 10 мрад, полным зарядом более 100 пКл и максимальным уровнем энергии ~ 10 МэВ при взаимодействии тераваттного Ti:Sa лазерного излучения релятивистской интенсивности 5×10^{18} Вт/см 2 с кластерами азота оптимального (~ 7 нм) радиуса, полученными за счет выбора давления газа. Создание кластеризованной среды на границе области конденсации позволило увеличить заряд пучка в 7 раз по сравнению с газовой фазой. Выполнен термодинамический анализ размера, концентрации и фазового состояния агрегатов азота, найдены условия ($P_0 = 30$ бар, $T_0 = 298$ К, фокусировка на передний край струи за 1.2 мм от оси сопла), при которых формируется кластерная среда, позволяющая осуществлять эффективную инжекцию и ускорение электронов.

Финансирование работы. Работа в части исследования спектров электронов выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения # 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г., в части исследований формы плазменного канала в рамках государственного задания Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”.

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

1. T. Tajima, X. Q. Yan, and T. Ebisuzaki, Rev. Mod. Plasma Phys. **4**, 7 (2020).
2. I. Y. Kostyukov and A. M. Pukhov, Phys.-Uspekhi **58**, 81 (2015).
3. F. Albert, Phys. Plasmas **30**, 050902 (2023).
4. Т. А. Семенов, И. М. Мордвинцев, С. А. Шуляпов, Д. А. Горлова, А. В. Лазарев, К. А. Иванов, М. С. Джиджоев, А. Б. Савельев, В. М. Гордиенко, Оптика и спектроскопия **131**, 222 (2023).

5. Y. Li, J. Feng, W. Wang, J. Tan, X. Ge, F. Liu, W. Yan, G. Zhang, C. Fu, and L. Chen, *High Power Laser Sci. Eng.* **10**, e33 (2022).
6. W.-Z. Wang, J. Feng, X.-P. Zhang, Y.-J. Li, W.-J. Zhou, W.-C. Yan, G.-Q. Zhang, C.-B. Fu, and L.-M. Chen, *High Power Laser Sci. Eng.* **12**, e11 (2024).
7. M. H. Cho, V. B. Pathak, H. T. Kim, and C. H. Nam, *Sci. Rep.* **8**, 16924 (2018).
8. M. W. Mayr, B. Spiers, R. Aboushelbaya, R. W. Paddock, J. D. Sadler, C. Sillett, R. H. W. Wang, K. Krushelnick, and P. A. Norreys, *Phys. Rev. Accel. Beams* **23**, 093501 (2020).
9. C. Aniculaesei, V. B. Pathak, K. H. Oh, P. K. Singh, B. R. Lee, C. I. Hojbota, T. G. Pak, E. Brunetti, B. J. Yoo, J. H. Sung, S. K. Lee, H. T. Kim, and C. H. Nam, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 044041 (2019).
10. Z. Léczy, A. Andreev, and N. Hafz, *Phys. Rev. E* **102**, 053205 (2020).
11. T. Ditmire, T. Donnelly, A. M. Rubenchik, R. W. Falcone, and M. D. Perry, *Phys. Rev. A* **53**, 3379 (1996).
12. M. Mirzaie, N. A. M. Hafz, S. Li, F. Liu, F. He, Y. Cheng, and J. Zhang, *Rev. Sci. Instrum.* **86**, 103502 (2015).
13. L. M. Chen, W. C. Yan, D. Z. Li et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **3**, 1912 (2013).
14. K. C. Gupta, N. Jha, P. Deb, D. R. Mishra, and J. K. Fuloria, *J. Appl. Phys.* **118** (2015).
15. В. П. Крайнов, Б. М. Смирнов, М. Б. Смирнов, *Успехи физических наук* **177**, 953 (2007).
16. Д. А. Гожев, С. Г. Бочкарев, В. Ю. Быченков, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 233 (2021).
17. P. Koester, G. Bussolino, G. Cristoforetti, A. Faenov, A. Giuletta, D. Giuletta, L. Labate, T. Levato, T. Pikuz, and L. Gizzi, *Laser Part. Beams* **33**, 331 (2015).
18. A. J. Goers, G. A. Hine, L. Feder, B. Miao, F. Salehi, J. K. Wahlstrand, and H. M. Milchberg, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 194802 (2015).
19. D. E. Cardenas, S. Chou, E. Wallin, J. Xu, L. Hofmann, A. Buck, K. Schmid, D. E. Rivas, B. Shen, A. Gonoskov, M. Marklund, and L. Veisz, *Phys. Rev. Accel. Beams* **23**, 112803 (2020).
20. M.-W. Lin, T.-Y. Chu, Y.-Z. Chen, D. K. Tran, H.-H. Chu, S.-H. Chen, and J. Wang, *Phys. Plasmas* **27**, 113102 (2020).
21. J. Kim, Y. H. Hwangbo, and K. N. Kim, *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 034008 (2018).
22. C. McGuffey, A. G. R. Thomas, W. Schumaker, T. Matsuoka, V. Chvykov, F. J. Dollar, G. Kalintchenko, V. Yanovsky, A. Maksimchuk, K. Krushelnick, V. Yu. Bychenkov, I. V. Glazyrin, and A. V. Karpeev, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 025004 (2010).
23. B. S. Rao, A. Moorti, J. A. Chakera, P. A. Naik, and P. D. Gupta, *Plasma Phys. Control. Fusion* **59**, 065006 (2017).
24. S. Namba, N. Hasegawa, K. Nagashima, T. Kawachi, M. Kishimoto, K. Sukegawa, and K. Takiyama, *Phys. Rev. A* **73**, 013205 (2006).
25. К. В. Брушлинский, *Математические основы вычислительной механики жидкости, газа и плазмы*, Дом Интеллект, Долгопрудный (2017).
26. A. V. Lazarev, T. A. Semenov, E. D. Belega, and V. M. Gordienko, *J. Supercrit. Fluids* **187**, 105631 (2022).
27. *NIST Chemistry WebBook*, National Institute of Standards and Technology, USA (2023) <http://webbook.nist.gov>.
28. B. Aurand, L. Reichwein, K. M. Schwind, E. Aktan, M. Cerchez, V. Kaymak, L. Lessmann, R. Prasad, J. Thomas, T. Toncian, A. Khokkaz, A. Pukhov, and O. Willi, *New J. Phys.* **24**, 033006 (2022).
29. П. А. Щеглов, М. М. Назаров, Т. А. Семенов, А. А. Таусенев, М. В. Чашин, А. В. Лазарев, В. М. Гордиенко, *Квантовая электроника* **54**, 236 (2024).
30. А. А. Таусенев, П. А. Щеглов, М. В. Чашин, А. В. Лазарев, Т. А. Семенов, М. М. Назаров, *Ученые записки физического факультета* **3**, 2431001 (2024).
31. А. В. Митрофанов, М. В. Рожко, М. М. Назаров, Н. В. Якушкин, Я. О. Романовский, А. А. Воронин, А. Б. Федотов, Д. А. Сидоров-Бирюков, *Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия* **79**, 2430401 (2024).
32. Y. Fukuda, Y. Akahane, M. Aoyama et al. (Collaboration), *Phys. Lett. A* **363**, 130 (2007).
33. A. Pukhov, Z.-M. Sheng, and J. Meyer-ter Vehn, *Phys. Plasmas* **6**, 2847 (1999).
34. B. Hidding, M. Geissler, G. Pretzler, K.-U. Amthor, H. Schwoerer, S. Karsch, L. Veisz, K. Schmid, and R. Sauerbrey, *Phys. Plasmas* **16**, 043105 (2009).
35. S. Das, P. Sharma, R. Singh, R. K. Vatsa, and V. K. Tripathi, *J. Photochem. Photobiol.* **404**, 112884 (2021).
36. V. M. Gordienko, M. S. Dzhidzhoev, I. A. Zhvaniya, V. T. Platonenko, D. N. Trubnikov, and D. O. Fedorov, *Eur. Phys. J. D.* **67**, 1 (2013).
37. Т. А. Семенов, К. А. Иванов, А. В. Лазарев, И. Н. Цымбалов, Р. В. Волков, И. А. Жвания, М. С. Джиджоев, А. Б. Савельев, В. М. Гордиенко, *Квантовая электроника* **51**, 838 (2021).
38. I. A. Zhvaniya, K. A. Ivanov, T. A. Semenov, M. S. Dzhidzhoev, R. V. Volkov, I. N. Tsymbalov, A. B. Savel'ev, and V. M. Gordienko, *Laser Phys. Lett.* **16** (2019).
39. W. M. Wood, G. Focht, and M. C. Downer, *Opt. Lett.* **13**, 984 (1988).
40. D. Z. Li, W. C. Yan, L. M. Chen, K. Huang, Y. Ma, J. R. Zhao, L. Zhang, N. Hafz, W. M. Wang, J. L. Ma, Y. T. Li, Z. Y. Wei, J. Gao, Z. M. Sheng, and J. Zhang, *Opt. Express* **22**, 12836 (2014).

41. A. Giulietti, A. André, S. Dobosz Dufrénoy, D. Giulietti, T. Hosokai, P. Koester, H. Kotaki, L. Labate, T. Levato, R. Nuter, N. C. Pathak, P. Monot, and L. A. Gizzi, *Phys. Plasmas* **20**, 082307 (2013).
42. A. Buck, K. Zeil, A. Popp et al. (Collaboration), *Rev. of Sci. Instr.* **81**, 033301 (2010).
43. D. Hazra, A. Moorti, B.S. Rao, A. Upadhyay, J. A. Chakera, and P. A. Naik, *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 085015 (2018).
44. D. Hazra, A. Moorti, S. Mishra, A. Upadhyay, and J. A. Chakera, *Plasma Phys. Control. Fusion* **61**, 125016 (2019).
45. I. Last and J. Jortner, *Chem. Phys.* **399**, 218 (2012).

Рамсеевская спектроскопия резонансов КПН на D_1 линии атомов щелочных металлов в миниатюрных ячейках в поле встречных волн с противоположными круговыми поляризациями

В. И. Юдин⁺⁺¹⁾, М. Ю. Басалаев^{++*}, Д. А. Раднатаров⁺, И. В. Громов⁺, М. Д. Радченко^{++*}, С. М. Кобцев⁺,
А. В. Тайченачев^{++*}

⁺Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Институт лазерной физики Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

⁺⁺Новосибирский государственный технический университет, 630073 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2024 г.

После переработки 28 августа 2024 г.

Принята к публикации 29 августа 2024 г.

В работе представлены теоретические и экспериментальные исследования рамсеевской спектроскопии резонансов когерентного пленения населенности, возбуждаемых на D_1 линии атомов щелочных металлов в миниатюрных газовых ячейках. Рассматривается конфигурация поля, состоящего из двух встречных бегущих волн с противоположными круговыми поляризациями. При этом встречная волна формируется путем отражения от частично пропускающего выходного зеркала, в то время как регистрируется сигнал от прошедшей через зеркало исходной волны. Показано, что в такой схеме существует оптимальное значение для коэффициента отражения зеркала, при котором кратковременная стабильность может быть существенно улучшена по отношению к стандартной схеме без встречной волны. Экспериментально продемонстрировано 3-х кратное улучшение кратковременной стабильности атомных часов на основе резонанса когерентного пленения населенности в газовой ячейке с атомами ^{87}Rb .

DOI: 10.31857/S0370274X24100033, EDN: EIYNDY

1. Введение. Атомные часы представляют собой квантовые устройства для высокоточных измерений частоты и времени. Обширная область их применения включает в себя такие важные направления, как навигация и позиционирование, синхронизация и передача данных, метрология, геодезия, проверка фундаментальных физических теорий и др. [1–9]. В малогабаритных атомных часах радиочастотного диапазона в качестве репера частоты широко используются резонансы когерентного пленения населенностей (КПН) на D_1 линии атомов щелочных металлов [10–14]. К преимуществам таких устройств относятся их компактность и низкое энергопотребление, обусловленные применением чисто оптических методов для возбуждения резонанса между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния.

Одной из главных проблем, ограничивающих долговременную стабильность атомных часов, является световой сдвиг частоты реперного перехода при взаимодействии атомов с пробным лазерным полем. Большим потенциалом для решения данной пробле-

мы обладают устройства, основанные на рамсеевской спектроскопии резонансов КПН [15–18], для которых могут быть использованы различные высокоэффективные методы подавления полевого сдвига [10–24].

Однако наряду с долговременной стабильностью важной характеристикой атомных часов является кратковременная стабильность, на которую влияют такие параметры резонанса, как амплитуда и ширина. В наиболее распространенном случае возбуждения КПН резонансов излучением с круговой поляризацией происходит оптическая накачка атомов на крайний зеемановский подуровень сверхтонкой компоненты основного состояния с наибольшим угловым моментом. Атомы, накапливаясь в данном ловушечном состоянии, не дают вклад в формирование когерентности между рабочими зеемановскими подуровнями с проекцией углового момента $m = 0$. Вследствие этого, амплитуда реперного резонанса не достигает своего возможного максимального значения, что ограничивает кратковременную стабильность. Для устранения ловушечного состояния в [25] был разработан метод возбуждения резонансов КПН в поле, образованном двумя встречными бегущими волнами с противоположными круговыми

¹⁾e-mail: viyudin@mail.ru

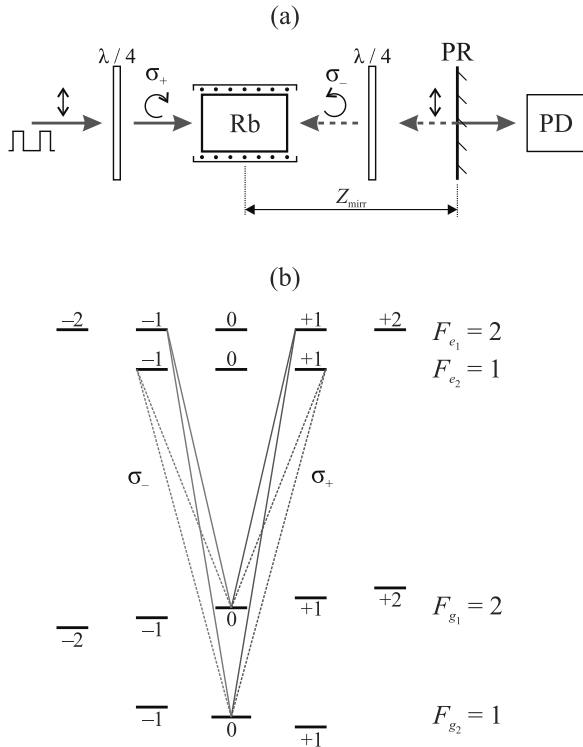


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схема формирования $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурации поля: PR – частично пропускающее зеркало, PD – фотоприемник. (б) – Схема светоиндуцированных переходов, участвующих в возбуждении резонанса КПН между состояниями $|F_{g1} = 2, m = 0\rangle$ и $|F_{g2} = 1, m = 0\rangle$ для D₁ линии атомов ^{87}Rb в $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурации бихроматического поля

поляризациями (так называемая $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурация), который был экспериментально апробирован для спектроскопии непрерывного типа [26]. Вариант рамсеевской спектроскопии в $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурации был реализован только для лазерно-охлажденных атомов [27].

В настоящей работе мы исследуем возможность существенного улучшения кратковременной стабильности атомных часов, основанных на рамсеевской спектроскопии резонансов КПН в миниатюрных газовых ячейках, при использовании схемы [25]. В нашем случае встречная волна с противоположной круговой поляризацией создается с помощью зеркала с частичным пропусканием света и возможностью варьировать коэффициент отражения. Расчеты сигнала ошибки на примере D₁ линии атомов ^{87}Rb показывают наличие оптимального значения коэффициента отражения зеркала, при котором наклон дискриминантной кривой имеет максимальное значение. Теоретические выводы подтверждаются результатами эксперимента, где получено улучшение кратковременной стабильности

КПН часов в 3 раза по сравнению со стандартной схемой без встречной волны.

2. Теория. В качестве конкретного примера рассмотрим взаимодействие полной сверхтонкой структуры уровней на D₁ линии в атомах ^{87}Rb с последовательностью рамсеевских импульсов бихроматического поля, состоящего из двух резонансных встречных волн с противоположными круговыми поляризациями:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(t) = & \left[E_1^{(+)}(t)e^{ik_1z}\mathbf{e}_{+1} + E_1^{(-)}(t)e^{-ik_1z}\mathbf{e}_{-1} \right] e^{-i[\omega_1t + \varphi_1(t)]} + \\ & \left[E_2^{(+)}(t)e^{ik_2z}\mathbf{e}_{+1} + E_2^{(-)}(t)e^{-ik_2z}\mathbf{e}_{-1} \right] e^{-i[\omega_2t + \varphi_2(t)]} + \\ & \text{с.с.}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_{\pm 1} = \pm(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$ есть единичные векторы правой (σ_+) и левой (σ_-) круговой поляризации света; $E_{1,2}^{(\pm)}(t)$ есть комплексные амплитуды соответствующих спектральных компонент; зависимости $\varphi_{1,2}(t)$ описывают фазовую модуляцию поля, используемую нами для генерации сигнала ошибки. Для определенности будем полагать, что $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурация встречных волн формируется путем отражения падающей бихроматической волны с σ_+ поляризацией от зеркала и преобразования ее при прохождении через $\lambda/4$ пластинку во встречную волну с σ_- поляризацией, как схематически изображено на рис. 1а. Структура энергетических уровней для D₁ линии ^{87}Rb и схема светоиндуцированных переходов, формирующих резонанс КПН между состояниями $|F_{g1} = 2, m = 0\rangle$ и $|F_{g2} = 1, m = 0\rangle$, изображены на рис. 1б.

Для D₁ линии атомов щелочных металлов, как показано в работе [25], КПН состояния для каждой из встречных σ_+ и σ_- волн (которые являются суперпозицией зеемановских подуровней основного состояния $|F_{g1}, m = 0\rangle$ и $|F_{g2}, m = 0\rangle$) совпадают при условии:

$$2(k_1 - k_2)Z_{\text{mirr}} = (2n + 1)\pi \quad (n = 0, 1, 2 \dots), \quad (2)$$

где Z_{mirr} есть расстояние до зеркала (см. на рис. 1а). В этом случае имеет место конструктивная интерференция двух-фотонных переходов от разных круговых поляризаций и амплитуда резонанса КПН максимальна. Однако для выполнения условия (2) в протяженной среде необходимо использовать достаточно миниатюрные газовые ячейки, продольный размер L которых имеет следующее ограничение:

$$L \ll 2\pi/(k_1 - k_2). \quad (3)$$

В частности, для ^{87}Rb следует использовать газовые ячейки с длиной $L \ll 4.4$ см.

Временную динамику атомов будем описывать на основе квантового кинетического уравнения для матрицы плотности $\hat{\rho}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) + \hat{\Gamma}\{\hat{\rho}\} = -\frac{i}{\hbar}[(\hat{H}_0 + \hat{V}_E(t) + \hat{V}_B), \hat{\rho}], \quad (4)$$

где $\hat{H}_0$ – гамильтониан невозмущенного атома; $\hat{V}_E(t) = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}(t)$ есть оператор взаимодействия атомов с лазерным полем ($\hat{\mathbf{d}}$ – оператор электрического дипольного момента, $\mathbf{E}(t)$ – вектор напряженности электрического поля); $\hat{V}_B = -\hat{\mu}\mathbf{B}$ есть оператор взаимодействия атомов со статическим магнитным полем, которое используется для расщепления зеемановских подуровней ($\hat{\mu}$ – оператор магнитного момента, $\mathbf{B}$ – вектор индукции магнитного поля); линейный функционал $\hat{\Gamma}\{\hat{\rho}\}$ описывает релаксационные процессы. Модель включает в себя следующие константы релаксации: γ_{sp} – скорость спонтанного распада возбужденного состояния, γ_{opt} – скорость затухания оптических когерентностей, γ_g и γ_e – скорости релаксации атомов к равновесному изотропному распределению по зеемановским подуровням основного и возбужденного состояний соответственно. Будем полагать, что столкновительное уширение буферным газом оптических переходов превышает доплеровскую ширину (т.е. $\gamma_{\text{opt}} > k\bar{v}$, где $\bar{v}$ – тепловая скорость атомов). В этом случае доплеровскими эффектами от движения атомов можно пренебречь и рассматривать модель неподвижных атомов.

В приближении оптически тонкой среды амплитуда встречной σ_- волны связана с амплитудой падающей σ_+ волны следующим образом:

$$|E_j^{(-)}|^2 = \alpha |E_j^{(+)}|^2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (j = 1, 2), \quad (5)$$

где α представляет собой некоторый эффективный коэффициент отражения, который складывается из отражения на зеркале и потерь на оптических элементах схемы. В расчетах мы использовали определения: $R_j^{(\pm)} = |d_{eg} E_j^{(\pm)}|/\hbar$ для частот Раби (где $d_{eg} = \langle J_e || \hat{\mathbf{d}} || J_g \rangle$ – приведенный матричный элемент оператора электрического дипольного момента) и параметр $\Omega_L = \mu_B |\mathbf{B}|/\hbar$, характеризующий зеемановское расщепление сверхтонких уровней (где μ_B – магнетон Бора).

В качестве спектроскопического сигнала мы рассматриваем поглощение падающей волны с σ_+ поляризацией. Стабилизацию частоты в КПН часах будем проводить с помощью сигнала ошибки для рамсеевской спектроскопии с использованием техники

фазовых прыжков. В этом случае относительная фаза $(\phi_1 - \phi_2)$ частотных компонент для соседних рамсеевских импульсов отличается на величину $\pm\pi/2$. Схематический вид периодической последовательности рамсеевских импульсов и соответствующих фазовых прыжков показан на рис. 2. При этом каж-

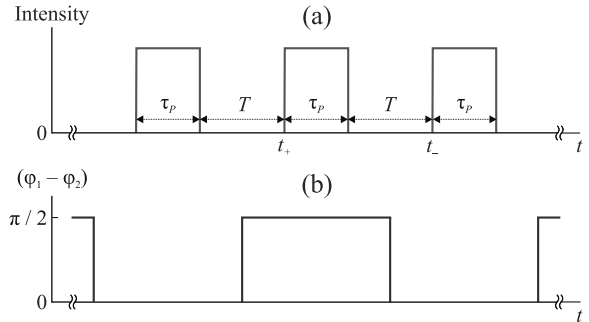


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схематический вид периодической последовательности рамсеевских импульсов с длительностью τ_p и временем свободной эволюции T : (a) – Модуляция интенсивности поля; (b) – Модуляция разности фаз спектральных компонент бихроматического поля для формирования сигнала ошибки (6)

дый импульс служит одновременно для опроса атомов и накачки их в КПН состояние. Сигнал ошибки формируется как разность интегральных сигналов поглощения между соседними рамсеевскими импульсами, что математически может быть записано следующим образом:

$$S(\delta_R) = \int_{t_+}^{t_+ + \tau_p} A^{(+)}(t, +\pi/2) dt - \int_{t_-}^{t_- + \tau_p} A^{(+)}(t, -\pi/2) dt, \quad (6)$$

где $A^{(+)}(t, \pm\pi/2)$ – сигнал поглощения волны с правой круговой поляризацией (σ_+) при относительной фазе частотных компонент $(\phi_1 - \phi_2) = \pm\pi/2$, $\delta_R = (\omega_1 - \omega_2 - \omega_{\text{hfs}})$ есть рамановская отстройка (где ω_{hfs} – частота сверхтонкого расщепления основного состояния). Для иллюстрации на рис. 3 представлен расчет временной динамики сигналов $A^{(+)}(t, \pm\pi/2)$ во время действия рамсеевских импульсов.

Как видно из рис. 4, преимущество $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурации по сравнению с обычной схемой (т.е. одна бегущая волна с круговой поляризацией) состоит в значительном увеличении амплитуды сигнала ошибки. Этот результат обусловлен тем, что встречная волна с σ_- поляризацией откачивает атомы из крайнего зеемановского подуровня $|F_{g1} = 2, m = 2\rangle$, не взаимодействующего с σ_+ полем, и тем самым увеличивает число атомов в состоянии КПН. При этом ширина резонанса не зависит от интенсивности полей (в отличие от спектроскопии непрерывного типа) и определяется только временем свободной эволюции.

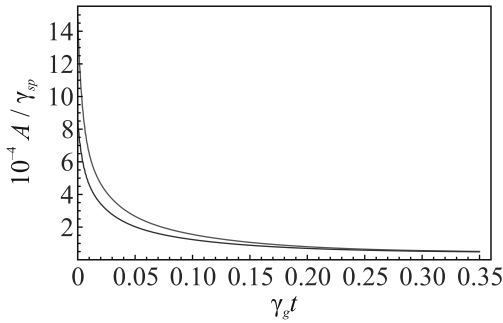


Рис. 3. (Цветной онлайн) Временная динамика сигнала поглощения во время действия рамсеевских импульсов: красная сплошная линия соответствует $A^{(+)}(t, +\pi/2)$, синяя штриховая линия соответствует $A^{(+)}(t, -\pi/2)$. Параметры расчетов: $R_1^{(+)}/\gamma_{sp} = R_2^{(+)}/\gamma_{sp} = 0.5$, $\alpha = 0.25$, $\tau_P = 0.5\gamma_g^{-1}$, $T = \gamma_g^{-1}$, $\Omega_L/\gamma_{sp} = 0.05$, $\gamma_{opt}/\gamma_{sp} = 50$, $\gamma_g/\gamma_{sp} = 10^{-5}$, $\gamma_e/\gamma_{sp} = 20$, $\delta_R T = \pi/4$

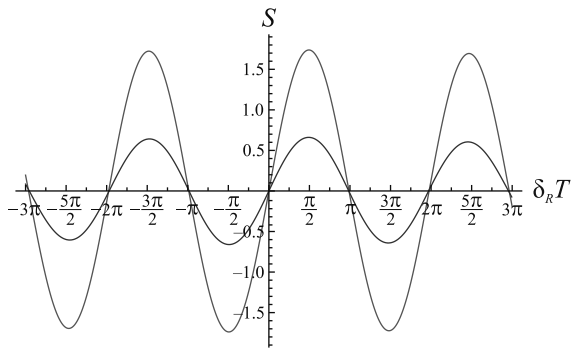


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость сигнала ошибки $S(\delta_R)$ от двух-фотонной отстройки: красная сплошная линия соответствует коэффициенту отражения $\alpha = 0.25$, синяя штриховая линия соответствует стандартной схеме без встречной волны (т.е. $\alpha = 0$). Параметры расчетов: $R_1^{(+)}/\gamma_{sp} = R_2^{(+)}/\gamma_{sp} = 0.5$, $\tau_P = 0.5\gamma_g^{-1}$, $T = \gamma_g^{-1}$, $\Omega_L/\gamma_{sp} = 0.05$, $\gamma_{opt}/\gamma_{sp} = 50$, $\gamma_g/\gamma_{sp} = 10^{-5}$, $\gamma_e/\gamma_{sp} = 20$

Одним из ключевых параметров, влияющих на кратковременную стабильность, является наклон линейного участка сигнала ошибки в центре резонанса:

$$K = \left. \frac{\partial S}{\partial \delta_R} \right|_{\delta_R=0}. \quad (7)$$

На рисунке 5 представлена зависимость наклона K от коэффициента отражения α , который задает соотношение между амплитудами падающей и встречной волн. Как видно из данного рисунка, наличие встречной волны с противоположной круговой поляризацией ($\alpha > 0$) приводит к увеличению наклона сигнала ошибки по сравнению со схемой без отраженной волны ($\alpha = 0$). При этом зависимость $K(\alpha)$ имеет выраженный максимум. Физическое объяснение нали-

чия оптимального коэффициента отражения состоит в том, что в данной спектроскопической схеме имеется два конкурирующих процесса, для которых при определенном значении $\alpha = \alpha_{opt}$ достигается баланс. С одной стороны, увеличение коэффициента отражения зеркала ведет к росту амплитуды встречной σ_- волны и, следовательно, скорости откачки атомов из ловушечного состояния. В результате возрастает доля атомов в состоянии КПН, что приводит к увеличению амплитуды резонанса. С другой стороны, атомы, участвующие в поглощении отраженной волны, не дают вклад в сигнал поглощения детектируемой σ_+ волны, тем самым уменьшают амплитуду резонанса. Таким образом, при увеличении α амплитуда резонанса для детектируемой волны сперва возрастает за счет перекачки атомов из ловушечного состояния $|F_{g1} = 2, m = 2\rangle$ в состояние КПН, а затем начинает уменьшаться из-за увеличения доли атомов, вовлеченных в поглощение встречной волны. При некотором соотношении между интенсивностями встречных волн, которому соответствует α_{opt} , наблюдается максимум наклона для сигнала ошибки (6). Положение этого максимума зависит от интенсивности падающей волны и констант релаксации, которые определяют процессы оптической накачки атомов.

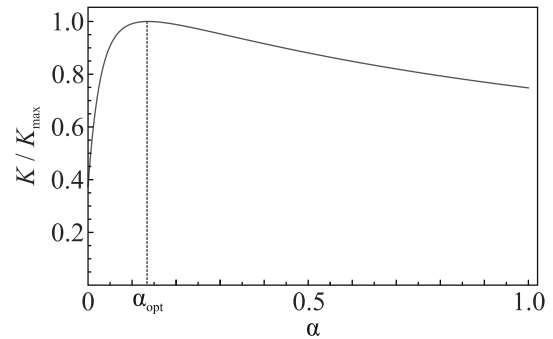


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость наклона сигнала ошибки K в центре линии от коэффициента отражения α . Параметры расчетов: $R_1^{(+)}/\gamma_{sp} = R_2^{(+)}/\gamma_{sp} = 0.5$, $\tau_P = \gamma_g^{-1}$, $T = \gamma_g^{-1}$, $\Omega_L/\gamma_{sp} = 0.05$, $\gamma_{opt}/\gamma_{sp} = 50$, $\gamma_g/\gamma_{sp} = 10^{-5}$, $\gamma_e/\gamma_{sp} = 20$

3. Эксперимент. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 6. В качестве источника излучения использовался DBR лазер с волоконным выходом и длиной волны 795 нм, соответствующей D_1 линии поглощения атомов ^{87}Rb . Газовая ячейка имела внутренний продольный размер $L = 5$ мм, что удовлетворяет критерию (3). Фазовая модуляция излучения на частоте, равной половине частоты сверхтонкого расщепления основ-

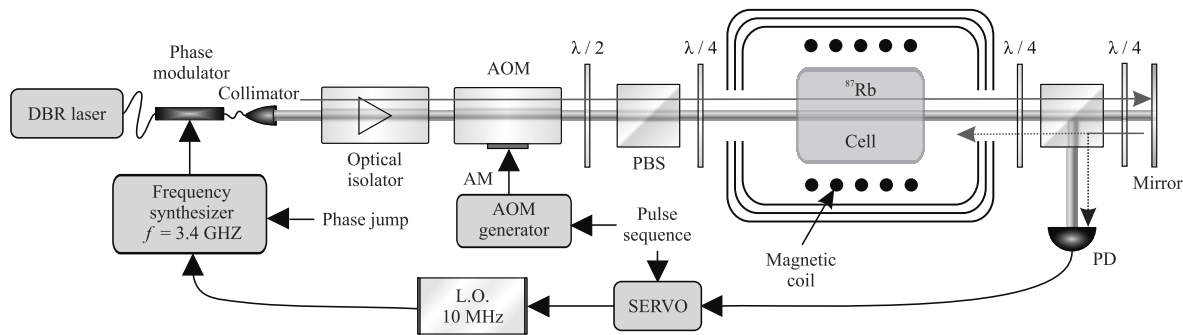


Рис. 6. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки: AOM – акустооптический модулятор; L.O. – локальный кварцевый осциллятор; $\lambda/2$ – полуволновая пластина; $\lambda/4$ – четвертьволновая пластина; PD – фотодетектор; PBS – поляризационный делитель; AOM generator – генератор сигнала, подаваемого на AOM; AM – сигнал амплитудной модуляции. Для изменения мощности отраженной волны вращалась четвертьволновая пластина, расположенная между PBS и зеркалом

ного состояния, осуществлялась с помощью волоконного электрооптического фазового модулятора. Полуволновая пластина совместно с поляризационным делителем использовалась для управления мощностью падающего на ячейку излучения. Также схема включает в себя три четвертьволновых пластины. Первая пластина формирует круговую σ_+ поляризацию падающей волны, в то время как вторая пластина формирует противоположную σ_- поляризацию для встречной волны. Третья пластина совместно с поляризационным делителем и глухим зеркалом образуют эффективное выходное зеркало с изменяемым коэффициентом отражения. При этом изменение коэффициента отражения достигается путем вращения волновой пластины. В зависимости от угла поворота этой пластины изменяется соотношение между излучением, попадающим на фотоприемник, и излучением с σ_- поляризацией, которое направляется обратно в газовую ячейку. Все оптические элементы имели просветляющее покрытие и при положении волновой пластины, соответствующего минимальному коэффициенту отражения эффективного выходного зеркала, на фотоприемник попадало не менее 98% от прошедшего сквозь ячейку света с σ_+ поляризацией. В экспериментах использовалась рамсеевская последовательность с длительностью импульсов 600 мкс и временем свободной эволюции 400 мкс.

Поскольку амплитуда сигнала ошибки периодически зависит от расстояния между глухим зеркалом и ячейкой, то на первом этапе была проведена оптимизация положения ячейки относительно этого зеркала для выполнения условия (2). На рисунке 7 показаны два сигнала ошибки при разных положениях ячейки, в которых достигается максимальная и минимальная амплитуды КПП резонанса.

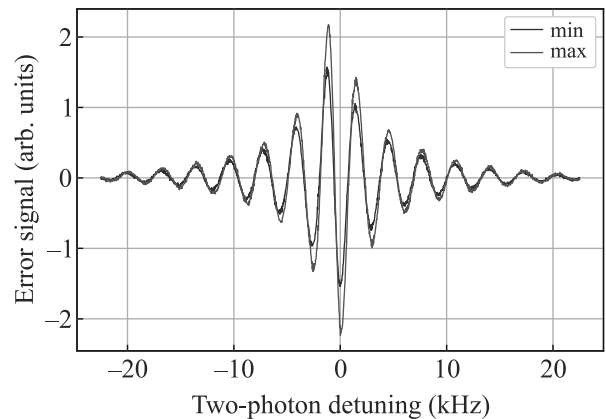


Рис. 7. (Цветной онлайн) Рамсеевские структуры в сигнале ошибки при разных положениях глухого зеркала относительно ячейки: синяя кривая соответствует случаю деструктивной интерференции двух-фотонных переходов для σ_+ и σ_- встречных волн, а красная кривая соответствует случаю конструктивной интерференции, когда выполняется условие (2)

Как видно, различие в амплитудах составляет около 30% и обусловлено конструктивным и деструктивным типом интерференции двух-фотонных переходов для падающей и встречной волн [25].

Далее, при оптимальном положении глухого зеркала была измерена зависимость кратковременной стабильности частоты от коэффициента отражения эффективного выходного зеркала при разных значениях мощности излучения. Из рисунка 8 видно, что эти зависимости имеют одинаковый характер: при увеличении коэффициента отражения до 30–40% стабильность улучшается, а затем начинает ухудшаться, т.е. имеется оптимальное значение для коэффициента отражения зеркала α_{opt} . В частности, при мощности излучения 50 мкВт удалось добиться улуч-

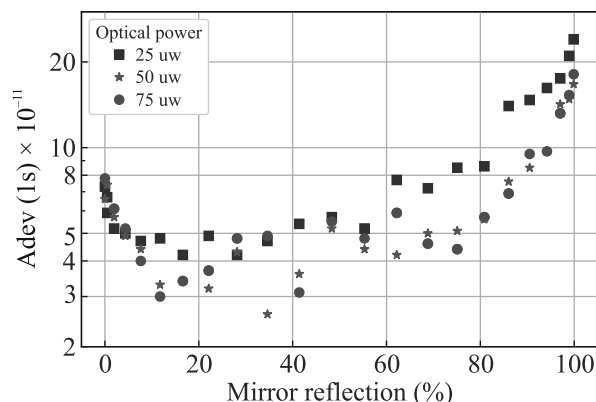


Рис. 8. (Цветной онлайн) Зависимость кратковременной стабильности от коэффициента отражения эффективного выходного зеркала при разных уровнях мощности излучения. Нулевое значение коэффициента отражения соответствует отсутствию отраженной волны

нения стабильности за 1 с с 7.6×10^{-11} до 2.6×10^{-11} (в 3 раза). Данные результаты имеют хорошее качественное согласие с приведенными выше теоретическими выводами.

4. Заключение. Для миниатюрных газовых ячеек нами исследована рамсеевская спектроскопия КПН резонансов, возбуждаемых лазерным полем с $\sigma_+ - \sigma_-$ конфигурацией, которая образована двумя встречными бегущими волнами с противоположными круговыми поляризациями. В нашей схеме встречная волна формируется с помощью зеркала с частичным пропусканием, в то время как регистрируется спектроскопический сигнал в прошедшей волне. Теоретически и экспериментально показано, что существует оптимальный коэффициент отражения выходного зеркала, которому соответствует наилучшая кратковременная стабильность. При этом в нашей установке достигнуто улучшение кратковременной стабильности в 3 раза по отношению к стандартной схеме без встречной волны: с 7.6×10^{-11} до 2.6×10^{-11} за 1 с. Представленные результаты могут быть обобщены на D_1 линию атомов других щелочных металлов (например, ^{85}Rb , ^{133}Cs).

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 22-72-10096). В. И. Юдин и С. М. Кобцев поддержаны Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант # FSUS-2020-0036).

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

2. M.S. Grewal, L.R. Weill, and A.P. Andrews, *Global Positioning Systems, Inertial Navigation, and Integration*, Wiley-Interscience, Hoboken, NJ (2007).
3. J.D. Prestage and G.L. Weaver, *Proc. IEEE* **95**, 2235 (2007).
4. A. Derevianko and M. Pospelov, *Nat. Phys.* **10**, 933 (2014).
5. Y. Bock and D. Melgar, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 106801 (2016).
6. C. Lisdat, G. Grosche, N. Quintin et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **7**, 12443 (2016).
7. M. Kajita, *Measuring Time: Frequency measurements and related developments in physics*, IOP Publishing, Bristol, UK (2018).
8. T.E. Mehlstäubler, G. Grosche, Chr. Lisdat, P.O. Schmidt, and H. Denker, *Rep. Prog. Phys.* **81**, 064401 (2018).
9. T.N. Bandi, *BEMS Reports* **9**, 1 (2023).
10. J. Vanier, *Appl. Phys. B* **81**, 421 (2005).
11. V. Shah and J. Kitching, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **59**, 21 (2010).
12. S. Knappe, P.D.D. Schwindt, V. Shah, L. Hollberg, J. Kitching, L. Liew, and J. Moreland, *Opt. Express* **13**, 1249 (2005).
13. Z. Wang, *Chin. Phys. B* **23**, 030601 (2014).
14. J. Kitching, *Appl. Phys. Rev.* **5**, 031302 (2018).
15. T. Zanon, S. Guerandel, E. de Clercq, D. Holleville, N. Dimarcq, and A. Clairon, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 193002 (2005).
16. C.M. Rivera-Aguilar, M. Callejo, A. Mursa, C. Carlé, R. Vicarini, M. Abdel Hafiz, J.-M. Friedt, N. Passilly, and R. Boudot, *Appl. Phys. Lett.* **124**, 114102 (2024).
17. Г.В. Волошин, К.А. Баранцев, А.Н. Литвинов, *ЖЭТФ* **165**, 230 (2024).
18. Д.С. Чучелов, М.И. Васильковская, Е.А. Цыганков, С.А. Зибров, К.М. Сабакарь, В.В. Васильев, В.Л. Величанский, *Письма в ЖЭТФ* **119**, 16 (2024).
19. V.I. Yudin, A.V. Taichenachev, M. Yu. Basalae, T. Zanon-Willette, J.W. Pollock, M. Shuker, E.A. Donley, and J. Kitching, *Phys. Rev. Appl.* **9**, 054034 (2018).
20. V.I. Yudin, A.V. Taichenachev, M. Yu. Basalae, T.E. Mehlstäubler, R. Boudot, T. Zanon-Willette, J.W. Pollock, M. Shuker, E.A. Donley, and J. Kitching, *New J. Phys.* **20**, 123016 (2018).
21. M. Abdel Hafiz, G. Coget, M. Petersen, C. Rocher, S. Guerandel, T. Zanon-Willette, E. de Clercq, and R. Boudot, *Phys. Rev. Appl.* **9**, 064002 (2018).
22. M. Shuker, J.W. Pollock, R. Boudot, V.I. Yudin, A.V. Taichenachev, J. Kitching, and E.A. Donley, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 113601 (2019).
23. M. Shuker, J.W. Pollock, R. Boudot, V.I. Yudin, A.V. Taichenachev, J. Kitching, and E.A. Donley, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 141106 (2019).

24. M. Yu. Basalaev, V. I. Yudin, D. V. Kovalenko, T. Zanon-Willette, and A. V. Taichenachev, Phys. Rev. A **102**, 013511 (2020).
25. А. В. Тайченачев, В. И. Юдин, В. Л. Величанский, С. В. Каргапольцев, Р. Винандс, Дж. Китчинг, Л. Холлберг, Письма в ЖЭТФ **80**, 265 (2004).
26. S. V. Kargapoltsev, J. Kitching, L. Hollberg, A. V. Taichenachev, V. L. Velichansky, and V. I. Yudin, Laser Phys. Lett. **1**, 495 (2004).
27. X. Liu, V. I. Yudin, A. V. Taichenachev, J. Kitching, and E. A. Donley, Appl. Phys. Lett. **111**, 224102 (2017).

О эквивалентности фазовых и поляризационных преобразований в квантовой оптике

С. Н. Молотков⁺¹⁾, И. С. Сущев^{*×}

⁺ Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

^{*} ООО “СФБ Лаб”, 127273 Москва, Россия

[×] Центр квантовых технологий и физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 августа 2024 г.

После переработки 29 августа 2024 г.

Принята к публикации 4 сентября 2024 г.

Приведен простой вывод соотношений, доказывающий эквивалентность при измерении корреляционных функций поля для поляризационных и фазовых преобразований состояний излучения в квантовой оптике.

DOI: 10.31857/S0370274X24100042, EDN: ELAYLF

Введение. В квантовой оптике и квантовой информатике часто возникает задача “экспериментального вычисления” корреляционных функций состояния поляризации оптического излучения. Часто гораздо проще и удобнее работать не с преобразованием состояний поляризации в оптических схемах “free space”, а с волоконной оптикой и фазовыми преобразованиями, что объясняется большим удобством работы и стабильностью волоконных схем. По этой причине возникает задача установления соответствия между измеряемыми величинами для поляризационных состояний и наблюдаемых, в том числе корреляторов, для фазовых состояний.

Подобное соответствие также используется в задачах квантовой криптографии, например, протокол RFI – Reference Frame Independent [1–3] реализуется как для систем, работающих в открытом пространстве, где он изначально и был предложен, так и для волоконных систем [4,5].

Поскольку в экспериментах соответствие между фазовыми и поляризационными преобразованиями часто используется на интуитивном уровне, что приводит к вопросам о законности такой замены, то для надежности требуется установить доказуемое соответствие между поляризационными и фазовыми преобразованиями.

Поскольку такие вопросы периодически возникают, то этот факт побудил получить простой вывод такого соответствия, что, на наш взгляд, будет полезным.

Ниже будет приведен вывод, доказывающий эквивалентность корреляционных функций для фазовых и поляризационных состояний излучения.

Корреляционные функции для поляризационных состояний и их инварианты. Любой эксперимент с состояниями поляризации в квантовой оптике состоит из нескольких стадий: 1) *приготовление состояний поляризации в некоторой системе координат/базисе*; 2) *преобразование состояний и их распространение на измерительное устройство*; 3) *измерение состояний поляризации в согласованной с системой координат при приготовлении в системе координат/базисе измерительного устройства (рис. 1).*

Введем обозначения. Пусть $|0_z\rangle$, $|1_z\rangle$ – состояния с левой и правой циркулярной поляризацией по оси z в системе координат приготовления состояний (рис. 1). Состояния для двух ортогональных поляризаций вдоль осей x и y будем обозначать как $|\pm\rangle$. Ортогональные состояния для двух диагональных направлений поляризаций в базисе, повернутом на 45° градусов по отношению к осям x и y , обозначим, соответственно, как $|\pm d\rangle$. Имея в виду приложения к квантовой оптике, более привычно выбрать в качестве базисных состояний состояния с горизонтальной и вертикальной поляризацией, которые обозначим соответственно как

$$|+\rangle \rightarrow |h\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \rightarrow |v\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Состояния в повернутом диагональном базисе на угол 45° в базисе xuz (рис. 1) выражаются через базисные состояния следующим образом

¹⁾ e-mail: sergei.molotkov@gmail.com

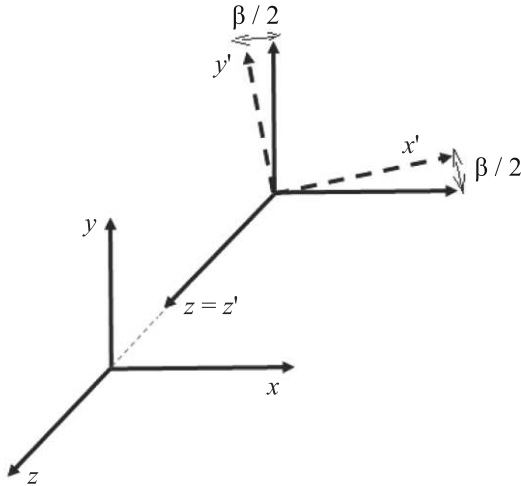


Рис. 1. (Цветной онлайн) Поворот системы координат при поляризационных измерениях. Ось z является общей – направлена *точно* между аппаратурой приготовления и измерения состояний поляризации, что имеет место в экспериментах, в противном случае состояния не попадают в измерительную аппаратуру

$$|\pm d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

и состояния с циркулярной поляризацией $|0_Z\rangle$ и $|1_Z\rangle$

$$\begin{aligned} |0_Z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \\ |1_Z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(i|+\rangle + |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2)$$

Данные состояния являются собственными векторами оператора σ_Z , который в базисе собственных векторов имеет вид

$$\sigma_Z = |0_Z\rangle\langle 0_Z| - |1_Z\rangle\langle 1_Z|, \quad (3)$$

$$\sigma_X = |+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|, \quad (4)$$

$$\sigma_Y = |+d\rangle\langle +d| - |-d\rangle\langle -d|, \quad (5)$$

с собственными значениями ± 1 .

Обратим внимание на то, что при выбранном базисе $|0\rangle = |+\rangle$ и $|1\rangle = |-\rangle$ из собственных векторов оператора σ_X представление операторов σ_Y и σ_Z отличается от представления операторов в базисе собственных векторов оператора σ_Z . Например, матричное представление операторов σ_X , σ_Y имеет вид²⁾

$$\sigma_X = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

²⁾ Отметим, что в [5] в качестве базисных векторов были выбраны другие собственные векторы.

$$\sigma_Y = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Результаты не зависят от выбора базисных векторов и представления операторов.

Пусть неточность ориентации системы координат при измерении состояний и системы координат при приготовлении состояний поляризации есть $\beta/2$, имеем для координат x и y

$$x' = c_{\beta/2}x + s_{\beta/2}y, \quad y' = -s_{\beta/2}x + c_{\beta/2}y, \quad (6)$$

$$c_{\beta/2} = \cos(\beta/2), \quad s_{\beta/2} = \sin(\beta/2).$$

Соответствующие преобразования состояний имеют вид

$$\begin{aligned} |+\rangle' &= c_{\beta/2}|+\rangle + s_{\beta/2}|-\rangle = \begin{pmatrix} c_{\beta/2} \\ s_{\beta/2} \end{pmatrix}, \\ |-\rangle' &= -s_{\beta/2}|+\rangle + c_{\beta/2}|-\rangle = \begin{pmatrix} -s_{\beta/2} \\ c_{\beta/2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

Преобразования состояний $|+\rangle'd$ и $|-\rangle'd$ получаются из соотношений (6), (7) по линейности.

Связь операторов в системе координат приготовления и регистрации состояний σ_{X_β} и σ_{Y_β} имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{X_\beta} &= \begin{pmatrix} c_\beta & s_\beta \\ s_\beta & -c_\beta \end{pmatrix} = c_\beta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \\ &+ s_\beta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = c_\beta \sigma_X + s_\beta \sigma_Y, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{Y_\beta} &= \begin{pmatrix} -s_\beta & c_\beta \\ c_\beta & s_\beta \end{pmatrix} = -s_\beta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \\ &+ c_\beta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -s_\beta \sigma_X + c_\beta \sigma_Y. \end{aligned}$$

Оператор σ_Z остается неизменным в обеих системах отсчета, в базисе горизонтальной и вертикальной поляризаций имеем

$$\sigma_{Z_\beta} = \sigma_Z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Определим коррелятор состояний поляризации, который не зависит от рассогласования систем координат при приготовлении и измерении состояний поляризации. Обозначим среднее по любому запутанному состоянию $|\Psi\rangle_{ij_\beta}$ как $\langle \sigma_i \sigma_{j_\beta} \rangle$. Прямым вычислением, учитывая (3)–(6), (8), находим вид *инвариантного оператора коррелятора для состояний поляризации*

$$\begin{aligned} \langle \sigma_X \sigma_{X_\beta} \rangle^2 + \langle \sigma_X \sigma_{Y_\beta} \rangle^2 + \langle \sigma_Y \sigma_{X_\beta} \rangle^2 + \langle \sigma_Y \sigma_{Y_\beta} \rangle^2 &= \\ &= \langle \sigma_X \sigma_X \rangle^2 + \langle \sigma_X \sigma_Y \rangle^2 + \langle \sigma_Y \sigma_X \rangle^2 + \langle \sigma_Y \sigma_Y \rangle^2. \end{aligned} \quad (9)$$

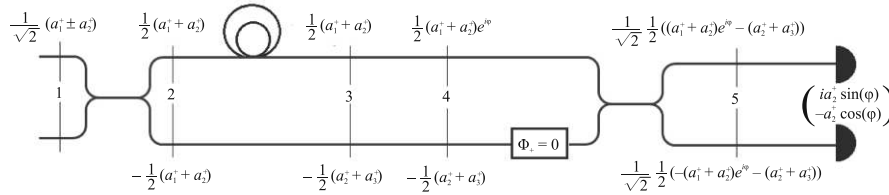


Рис. 2. (Цветной онлайн) Стадии преобразования состояний на интерферометре Маха-Цандера

Таким образом, сумма квадратов операторов корреляторов в базисах $+$ и $\times$ не зависит от угла β рассогласования систем координат при приготовлении и измерении состояний поляризации.

Отметим, что измерения коррелятора поляризаций между передающей и приемной стороной в прямом базисе $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ и повернутом на $\pi/4$ диагональном базисе $\{|+d\rangle, |-d\rangle\}$ означают, что оптические элементы передающей и приемной стороны “поворачивают системы координат” в этом базисе по отношению к системе координат в прямом базисе.

Забегая вперед, скажем, что аналогичный “поворот системы координат” при фазовом кодировании осуществляется фазовым модулятором в интерферометре (см. следующий раздел).

Фазовые преобразования состояний и корреляционные функции. Установим соответствие между преобразованием поляризации и преобразованием фазы квантовых состояний. Фазовые преобразования реализуются при помощи интерферометра Маха-Цандера (МЦ) с разной оптической длиной плеч – верхнего и нижнего оптических путей (рис. 2).

Ниже приведем подробный вывод преобразования состояний при прохождении через интерферометр, который неточно сбалансирован. Удобнее, как это обычно делается в квантовой оптике, преобразовывать не состояния, а операторы.

Фазовые преобразования в базисе $+$. Измерения корреляторов в базисе $+$ при фазовых преобразованиях реализуются “поворотом системы координат” при помощи фазового модулятора в одном из плеч интерферометра МЦ (рис. 2). Если выбран базис $+$, то фазовый модулятор не накладывает относительную фазу для состояний, прошедших по верхнему и нижнему путям интерферометра МЦ, $\Phi_+ = 0$ (рис. 2).

При идеальной балансировке интерферометра состояние, порождаемое операторами $\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ + a_2^+)_1$, будет регистрироваться нижним детектором, а состояние, порождаемое операторами $\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ - a_2^+)_1$ будет регистрироваться верхним детектором (рис. 2).

Входные однофотонные состояния в базисе $+$ для 0 и 1 состоят из двух импульсов сдвинутых относительно друг друга по времени. Состояние порождается оператором (рис. 2)

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ \pm a_2^+)_1,$$

знак $+$ отвечает 0, а знак $-$ соответствует 1.

Преобразованием однофотонных состояний при прохождении первого симметричного 50/50 светоделителя имеют вид (рис. 2)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + a_2^+ \\ 0 \end{pmatrix}_1 &= \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_1^+ + a_2^+ \\ -(a_1^+ + a_2^+) \end{pmatrix}_2. \end{aligned} \quad (10)$$

Задержка в интерферометре приводит к сдвигу состояний, распространяющихся по верхнему плечу интерферометра на расстояние, равное расстоянию между 1 и 2 импульсом. Формально, данному сдвигу отвечает следующее преобразование операторов рождения (рис. 2, временное окно 3),

$$\begin{aligned} U_{delay} \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + a_2^+ \\ -(a_1^+ + a_2^+) \end{pmatrix}_2 &= \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + a_2^+ \\ -(a_2^+ + a_3^+) \end{pmatrix}_3. \end{aligned} \quad (11)$$

Если интерферометр идеально сбалансирован – состояния в верхнем плече интерферометра сдвигаются идеально точно на расстояние, равное исходному расстоянию на входе интерферометра, то имеет место преобразование (11). Если разность хода по верхнему и нижнему плечу не строго отвечает расстоянию между исходными состояниями на входе, то такая неточность балансировки приводит к “навешиванию” дополнительной относительной фазы φ между состояниями в верхнем и нижнем плече интерферометра. В базисе $+$ – фаза $\varphi = 0$ “не навешивается” для состояний $a_1^+ + a_2^+$, но за счет неидеальной сба-

лансированности возникает фаза $\varphi \neq 0$ при прохождении верхнего плеча МЦ (рис. 2, временное окно 4)

$$U_\varphi = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_3 \quad (12)$$

$$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (a_1^+ + a_2^+) \\ -(a_2^+ + a_3^+) \end{pmatrix}_3 = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (a_1^+ + a_2^+)e^{i\varphi} \\ -(a_2^+ + a_3^+) \end{pmatrix}_4.$$

Преобразования на втором выходном светоделителе 50/50 в МЦ приводят к следующим преобразованиям операторов (рис. 2, временное окно 5),

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (a_1^+ + a_2^+)e^{i\varphi} \\ -(a_2^+ + a_3^+) \end{pmatrix}_4 = \\ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (a_1^+ + a_2^+)e^{i\varphi} - (a_2^+ + a_3^+) \\ -(a_2^+ + a_3^+)e^{i\varphi} - (a_2^+ + a_3^+) \end{pmatrix}_5. \quad (13)$$

Регистрация состояний на верхнем и нижнем детекторах производится во временном окне 2, которому отвечают операторы рождения с индексом 2, опуская операторы во временных окнах 1 и 3 – опуская операторы с индексами 1 и 3, получаем

$$\begin{pmatrix} a_2^+(e^{i\varphi} - 1) \\ -a_2^+(e^{i\varphi} + 1) \end{pmatrix}_5 \rightarrow \begin{pmatrix} ia_2^+ \sin(\varphi) \\ -a_2^+ \cos(\varphi) \end{pmatrix}_5 \rightarrow \\ \rightarrow \begin{pmatrix} i \sin(\varphi/2) |-\rangle_u \\ -\cos(\varphi/2) |+\rangle_d \end{pmatrix}_5, \quad (14)$$

где индексы u и d в (14) отвечают состояниям перед верхним и нижним детекторами.

Таким образом, на выходах интерферометра МЦ в центральном временном окне 2 будет состояние

$$\begin{pmatrix} -\cos(\varphi/2) |-\rangle_u \\ i \sin(\varphi/2) |+\rangle_d \end{pmatrix}_5. \quad (15)$$

Важно отметить, что (15) – это общее однофотонное состояние на обоих выходах. Имеется соответствие между состояниями $|-\rangle_u$, $|+\rangle_d$ и состояниями поляризации $|+\rangle$ и $|-\rangle$ (см. формулы (7)) на регистрирующей стороне. Неидеальность балансировки интерферометра дается углом φ , что соответствует неточности ориентации системы координат для поляризации, что дается углом разворота β .

Детектирование однофотонного состояния (15) верхним детектором происходит с вероятностью

$(\cos(\varphi/2))^2$, регистрация нижним детектором с вероятностью $(\sin(\varphi/2))^2$. Естественно, суммарная вероятность равна единице.

При идеальной балансировке интерферометра – разность хода по верхнему и нижнему пути точно равна расстоянию между двумя импульсами, $\varphi = 0$, в полной аналогии для регистрации состояний поляризации при точной ориентации системы координат на регистрирующей стороне по отношению к стороне приготовления состояний (см. предыдущий раздел).

Финальные преобразования можно представить в виде

$$\begin{aligned} |+\rangle &= -\cos(\varphi/2) |+\rangle_d + i \sin(\varphi/2) |-\rangle_u \\ |-\rangle &= i \sin(\varphi/2) |+\rangle_d - \cos(\varphi/2) |-\rangle_u \end{aligned}, \quad (16)$$

т.е. имеется соответствие с преобразованием состояний поляризации при повороте системы координат.

Заметим, что более аккуратно общее однофотонное состояние (16) перед верхним и нижним детекторами записывается как

$$\begin{aligned} |+\rangle &= -\cos(\varphi/2) |+\rangle_d \otimes |\text{vac}\rangle_u + i \sin(\varphi/2) |\text{vac}\rangle_d \otimes |-\rangle_u, \\ |-\rangle &= i \sin(\varphi/2) |+\rangle_d \otimes |\text{vac}\rangle_u - \cos(\varphi/2) |\text{vac}\rangle_d \otimes |-\rangle_u, \end{aligned}$$

где $|\text{vac}\rangle_{u,d}$ – вакуумные состояния поля на верхнем и нижнем плече перед детекторами. Для экономии обозначений будем использовать выражение (16).

Фазовые преобразования в базисе $\times$. Входные состояния для 0 и 1 состоят из двух импульсов (сечение 1 рис. 2)

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ \pm ia_2^+).$$

Далее рассматриваем преобразования состояний для состояний $\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ + ia_2^+)$, для состояний $\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ - ia_2^+)$ рассмотрение полностью аналогично. Состояния после прохождения первого светоделителя (сечение 2 рис. 2) имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ 0 \end{pmatrix}_1 = \\ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ -(a_1^+ + ia_2^+) \end{pmatrix}_2. \end{aligned}$$

Задержка в интерферометре (сечение 3 рис. 2) дает состояния

$$U_{\text{delay}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ -(a_1^+ + ia_2^+) \end{pmatrix}_2 =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ -(a_2^+ + ia_3^+) \end{pmatrix}_3.$$

В базисе $\times$ на интерферометре присутствует фаза $\Phi_\times = \pi/4$, $e^{i\Phi_\times} = i$, что приводит к появлению относительной фазы для состояний в верхнем и нижнем плече интерферометра МЦ в нижнем плече интерферометра МЦ, что приводит к преобразованию (сечение 4 рис. 2)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ -(a_2^+ + ia_3^+) \end{pmatrix}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_1^+ + ia_2^+ \\ -i(a_2^+ + ia_3^+) \end{pmatrix}_4.$$

Далее оставляем слагаемые только в центральном временном окне 2. Неидеальность интерферометра приводит к появлению “навешивания” дополнительной фазы φ , получаем

$$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} ia_2^+ \\ -ia_2^+ \end{pmatrix}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} ia_2^+ e^{i\varphi} \\ -ia_2^+ \end{pmatrix}_4.$$

Преобразование на втором выходном светоделителе (сечение 5 рис. 2) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} ia_2^+ e^{i\varphi} \\ -ia_2^+ \end{pmatrix}_4 = \\ = i \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_2^+ (e^{i\varphi} - 1) \\ -a_2^+ (e^{i\varphi} + 1) \end{pmatrix}_5, \end{aligned}$$

опуская общую фазу i , получаем

$$\rightarrow \begin{pmatrix} ia_2^+ \sin(\varphi/2) \\ -a_2^+ \cos(\varphi/2) \end{pmatrix}_5 \rightarrow \begin{pmatrix} i \sin(\varphi/2) | -d \rangle_u \\ -\cos(\varphi/2) | +d \rangle_d \end{pmatrix}_5.$$

Аналогичные преобразования состояния $a_1^+ - ia_2^+$ дают

$$\begin{pmatrix} -\cos(\varphi/2) | -d \rangle_u \\ i \sin(\varphi/2) | +d \rangle_d \end{pmatrix}_5.$$

Здесь введены обозначения $|+d\rangle_d$ и $|-d\rangle_u$ состояния перед верхним и нижним детекторами в диагональном базисе $\times (d)$.

Финальные преобразования состояний в диагональном базисе $\times (d)$ имеют вид

$$\begin{aligned} | +d \rangle &= -\cos(\varphi/2) | +d \rangle_d + i \sin(\varphi/2) | -d \rangle_u \\ | -d \rangle &= i \sin(\varphi/2) | +d \rangle_d - \cos(\varphi/2) | -d \rangle_u, \end{aligned}$$

здесь $| +d \rangle$ и $| -d \rangle$ состояния, которые регистрируются нижним (d -down) и верхним (u -up) детекторами (рис. 2) в диагональном базисе. При идеальной балансировке интерферометра неточность “ориентации относительной системы координат передающей и принимающей сторон” отсутствует, $\varphi = 0$. При неточной балансировке – неточной ориентации системы координат, $\varphi \neq 0$, поэтому вместо состояний $| +d \rangle_d$, $| -d \rangle_u$ регистрируются состояния $| +d \rangle$, $| -d \rangle$.

Таким образом, имеется полное соответствие между состояниями при преобразованиях поляризации и фазовых преобразованиях (см. (7) и (16)).

Преобразование корреляторов при фазовых преобразованиях. Выше были получены преобразования состояний на неидеально настроенном интерферометре МЦ. Ниже получим преобразование операторов.

Обозначим соответствие состояний при поляризационных и фазовых преобразованиях как

$$c_\beta \leftrightarrow \cos(\varphi), \quad s_\beta \leftrightarrow \sin(\varphi). \quad (17)$$

С учетом введенных обозначений для соответствия состояний и поворота системы координат (17), для корреляторов состояний в “повернутой системе координат” из-за неточной ориентации, получаем

$$\sigma_{X_\beta} = \cos(\varphi) \sigma_X + i \sin(\varphi) \sigma_Y. \quad (18)$$

Для коррелятора σ_{Y_β} в “повернутой системе координат” из-за неточной балансировки интерферометра МЦ находим

$$\sigma_{Y_\beta} = -i \sin(\varphi) \sigma_X + \cos(\varphi) \sigma_Y, \quad (19)$$

что соответствует закону преобразования операторов для поляризационных состояний.

Закключение. Таким образом, показано, что существует соответствие между преобразованиями поляризации и фазовыми преобразованиями. Показано также, что существует инвариант – корреляторы состояний поля, которые не зависят от точности балансировки интерферометра, что позволяет использовать волоконную реализацию экспериментов и тем самым добиться большего удобства и устойчивости оптических схем.

Выше были приведены фазовые преобразования для однофотонных состояний на языке преобразования операторов. Отметим, что выводы по соответствию поляризационных и фазовых преобразований остаются справедливым и для когерентных состояний.

С. Н. Молотков выражает благодарность И. М. Арбекову, В. Л. Елисееву, С. П. Кулику, А. В. Уривскому за интерес к работе, обсуждения и замечания, коллегам по Академии криптографии Российской Федерации и сотрудникам ИнфоТекс и СФБ Лаборатории, которые фактически инициировали данную работу для поддержки экспериментальных исследований.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке открытого акционерного общества “Российские железные дороги”.

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

1. A. Laing, V. Scarani, J. G. Rarity, and J. L. O’Brien, Phys. Rev. A **82**, 012304 (2010); arXiv/quant-ph:1003.1050.
2. J. Wabnig, D. Bitauld, H. W. Li, A. Laing, J. L. O’Brien, and A. O. Niskanen, New J. Phys. **15**, 073001 (2013).
3. H. Chen, J. Wang, B. Tang, Zh. Li, B. Liu, and Sh. Sun, Opt. Lett. **45**, 3022 (2020).
4. P. Zhang, K. Aungskunsiri, E. Martín-López, J. Wabnig, M. Lobino, R. W. Nock, J. Munns, D. Bonneau, P. Jiang, H. W. Li, A. Laing, J. G. Rarity, A. O. Niskanen, M. G. Thompson, and J. L. O’Brien, arXiv/quant-ph:1308.3436.
5. С. Н. Молотков, А. А. Щербаченко, Письма в ЖЭТФ **119**, 390 (2024).

Особенности структуры искровых каналов в прикатодной зоне

Е. В. Паркевич¹⁾

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

Поступила в редакцию 12 августа 2024 г.

После переработки 3 сентября 2024 г.

Принята к публикации 5 сентября 2024 г.

С использованием пикосекундного лазерного зондирования на длине волны 532 нм исследованы особенности генерации сильноионизованной плазмы с острейного катода после наступления электрического пробоя миллиметрового воздушного разрядного промежутка при атмосферном давлении. Обнаружено, что переход от микронного катодного пятна к растущему искровому каналу сопровождается формированием сферической плазменной области, находящейся в основе искрового канала в прикатодной зоне. Данная область имеет диаметр порядка 100 мкм и характеризуется уменьшением электронной плотности в ее центре, до $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, и увеличением, до $(5-6) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, в области ее оболочки шириной порядка 20 мкм. Показано, что рост последующего искрового канала обеспечивается мощным фронтом ионизации, зарождающимся на границах сферической плазменной области во время ее расширения в течение первой 1 нс после момента пробоя промежутка. Выдвинуты предположения о влиянии формирования сферической плазменной области в прикатодной зоне на дальнейшее развитие микроструктуры электрической искры.

DOI: 10.31857/S0370274X24100058, EDN: EQBNMI

Благодаря многочисленным свойствам импульсный наносекундный газовый разряд нашел широкое применение в различных областях фундаментальной и прикладной науки, включая, например, сильноточную электронику, генерацию наночастиц и плазменно-стимулированное горение [1]. Параметры плазмы, генерируемой во время наносекундного газового разряда, во многом определяются характеристиками используемого высоковольтного генератора, в зависимости от которых могут быть реализованы различные режимы развития разряда: коронный, тлеющий, стримерный, искровой или дуговой [2]. При определенных условиях данные режимы могут последовательно переходить друг в друга. Особый интерес представляет искровая стадия развития разряда, переход к которой сопровождается образованием искровых каналов сильноионизованной плазмы [2–7]. Нарботка такой плазмы в объеме разряда кардинально меняет результирующие характеристики всего разряда, а также существенно влияет на кинетику реакций в газоразрядной плазме и на распределение удельного энерговклада в газоразрядную среду. Недавние исследования в этой области раскрыли сложный характер генерации сильноионизованной плазмы после наступления электрического пробоя воздушных разрядных промежутков при атмосферном давлении. В частности, было показа-

но, что искровые каналы могут развиваться в виде скопления большого количества микроканалов сильноионизованной плазмы [8–11]. Установить причину мелкомасштабной искровой филаментации, к сожалению, до сих пор не удалось в виду чрезвычайной сложности диагностики данного явления. Тем не менее ряд косвенных фактов указывает на то, что на появление микроструктуры у искровых каналов могут влиять неустойчивости, развивающиеся в приэлектродной зоне на стадии перехода катодных и анодных пятен к растущим искровым каналам.

В данной работе получены детальные представления о динамике структуры плазмы вдоль искрового канала, развивающегося с острейного катода после наступления электрического пробоя миллиметрового воздушного разрядного промежутка при атмосферном давлении. Обнаружено, что переход от катодного пятна к растущему искровому каналу сопровождается возникновением сферической плазменной области в прикатодной зоне, обладающей резким градиентом электронной плотности. Обсуждаются особенности формирования данной области и ее возможное влияние на развитие микроструктуры электрической искры.

Экспериментальные измерения проводились на установке, описанной ранее в работе [12]. Для зондирования сильноионизованной плазмы разряда применялся Nd:YAG-лазер Lotis LS-2151 с излучением 1064 и 532 нм и энергией импульса до 80 мДж.

¹⁾e-mail: parkevich@phystech.edu

Часть энергии (до 80–90 %) выходного излучения лазера использовалась для запуска высоковольтного генератора (с джиттером менее 1 нс). Оставшаяся часть излучения (только вторая гармоника, длительность 70 пс) использовалась для зондирования разряда тремя пучками с наносекундной задержкой друг относительно друга. Плазма визуализировалась посредством лазерной интерферометрии, теневой и шпирен-фотосъемки с использованием многокадровой оптической системы регистрации (рис. 1), имею-

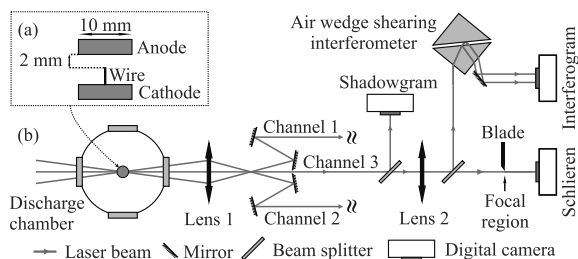


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Геометрия разрядного промежутка. (б) – Оптическая система зондирования тремя лазерными пучками

щей пространственное разрешение до 3 мкм. Изображения регистрировались с десятикратным увеличением на цифровые фотоаппараты Canon 1200, закрытые стеклянными светофильтрами. Генератор обеспечивал выходной 25 кВ импульс напряжения длительностью ≈ 40 нс со временем нарастания фронта ≈ 4 нс. Данный импульс подавался в разрядную камеру на воздушный промежуток с острым катодом (медная проволока 100 мкм в диаметре) и плоским анодом (медный цилиндр диаметром 10 мм). Зазор между торцом проволоки и анодом составлял 2 мм. В эксперименте измерялись ток через промежуток анодным шунтом и напряжение разряда с использованием резистивного делителя напряжения. Оба датчика были подробно описаны в работе [10] и имели субнаносекундное временное разрешение. Момент лазерного зондирования контролировался фотодатчиком Thorlabs DET025A с временным разрешением 150 пс. Сигналы всех датчиков регистрировались осциллографом LeCroy WM8620A (6 ГГц, 20 ГВб/с).

После подачи высоковольтного импульса на разрядный промежуток в среднем через 3–4 нс наступал электрический пробой (рис. 2), сопровождающийся резким спадом напряжения и ростом тока через промежуток (со скоростью нарастания около 100–200 А/нс). Момент появления сильноионизированной плазмы на остром катode в виде микронного катодного пятна (≈ 30 мкм в диаметре) с субнаносе-

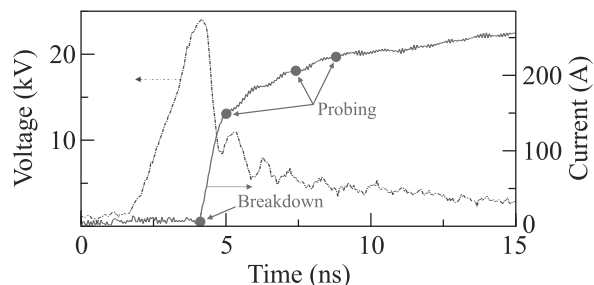


Рис. 2. (Цветной онлайн) Осциллограммы тока и напряжения разряда. Момент времени $t_{br} \approx 4.2$ нс соответствует наступлению электрического пробоя промежутка. Точками на осциллограмме тока отмечены моменты зондирования разряда

кундной точностью совпадал с началом электрического пробоя промежутка (рис. 3). Изображения катодного пятна получены спустя ≈ 0.5 нс после момента пробоя промежутка. Анализ данных, полученных при обработке интерферограмм на рис. 3, показал, что электронная плотность плазмы катодного пятна в среднем находится в диапазоне $(1-5) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, что указывает на взрывной характер его инициирования [13–15]. Интерферограммы обрабатывались вплоть до извлечения двумерных карт сдвига фазы. Далее карты трассировались, т.е. составлялся набор профилей сдвига фазы для большого количества проведенных срезов, проводилась симметризация профилей, и в итоге решалось обращенное интегральное уравнение Абеля [16]. Результирующая ошибка обработки не превышала 20 %. Сравнительный анализ тенеграм, полученных до и после момента пробоя, показал, что в области формирования катодного пятна наблюдаются существенные усиления (“светлые области”) и ослабления (“темные области”) интенсивности излучения. При моделировании дифракции лазерного пучка на плазменных микроструктурах в [17] было установлено, что возникновение таких локальных зон с возмущениями интенсивности обусловлено особенностями дифракции когерентного лазерного пучка на плазме с очень высокими градиентами электронной плотности. Данный факт находится в согласии с результатами обработки лазерных интерферограмм. В последующие наносекунды после момента пробоя катодное пятно трансформируется в сферическую область плазмы (диаметром ≈ 100 мкм) и распространяющийся от этой области в сторону анода фронт мощной ионизации. Последний прокладывает путь развития последующего искрового канала в направлении анода. Характерная скорость распространения фронта мощной ионизации составляет $\approx 9 \times 10^6 \text{ см/с}$, кото-

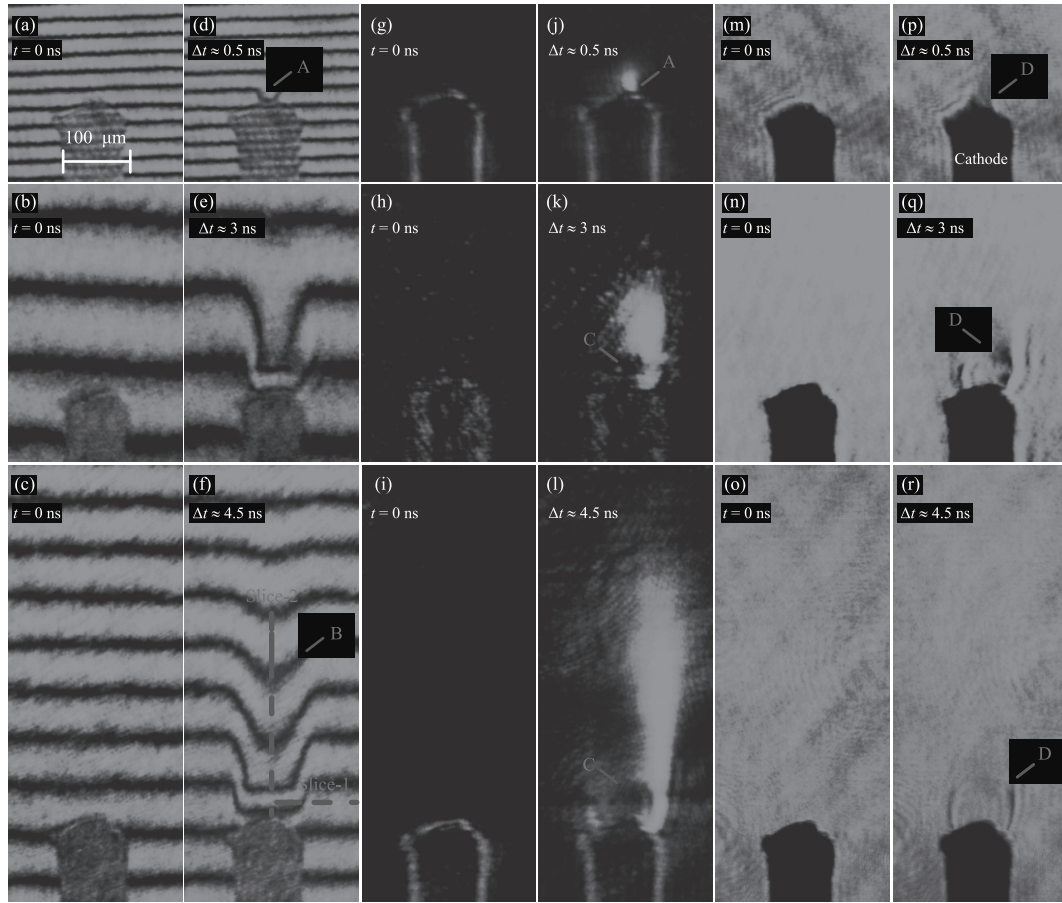


Рис. 3. (Цветной онлайн) Интерферограммы (a)–(f), шпирен-изображения (g)–(l) и тенеграммы (m)–(r), зарегистрированные в одиночном выстреле до ($t = 0$ нс) разряда и в различные моменты времени ($\Delta t = t - t_{br}$) после пробоя промежутка ($t_{br} \approx 5$ нс). Буквами на рисунках обозначены: А – катодное пятно, В – развивающийся искровой канал, С – сферическая область плазмы с высоким градиентом электронной плотности, D – зоны резкого падения контраста изображения

рая несколько превышает типичную скорость расширения сферической плазменной области в прикатодной зоне, $\approx 2 \times 10^6$ см/с (оценки получены для первых 3 нс после момента пробоя). При этом скорость расширения сферической области резко падает при достижении ею характерного диаметра в поперечнике, равного порядка 100 мкм. Дальнейшее (на протяжении десятков наносекунд) какое-либо увеличение поперечных размеров сферической области в прикатодной зоне и искрового канала определяется их гидродинамическим расширением вследствие выдавливания на периферию компонент разогретого воздуха. Анализ интерферограмм совместно с шпирен-изображениями, проведенный в приближении геометрической оптики [18] и с учетом нюансов визуализации плазмы при использовании асимметричного ножа Фуко [19], показал, что сферическая плазменная область характеризуется уменьшением элек-

тронной плотности в ее центре, до 3×10^{19} см $^{-3}$, и увеличением, до $(5-6) \times 10^{19}$ см $^{-3}$, в области ее оболочки (рис. 4). Типичная ширина оболочки сферической плазменной области, например, через ≈ 4.5 нс после момента пробоя составляет порядка 20 мкм. Наличие высокого градиента электронной плотности ($10^{22}-10^{23}$ см $^{-4}$) в оболочке сферической области может приводить к визуализации на тенеграмме мелкомасштабных зон с резким ослаблением или усилением интенсивности дифрагированного лазерного излучения вследствие аккумуляции дифракционных эффектов во время прохождения излучением неоднородной плазмы [17]. Это хорошо видно на тенеграмме на рис. 3, полученной через ≈ 4.5 нс после момента пробоя. Возмущения интенсивности излучения на тенеграмме в локальных областях могут дополнительно искажаться вследствие неточной юстировки оптической системы на объект при косом па-

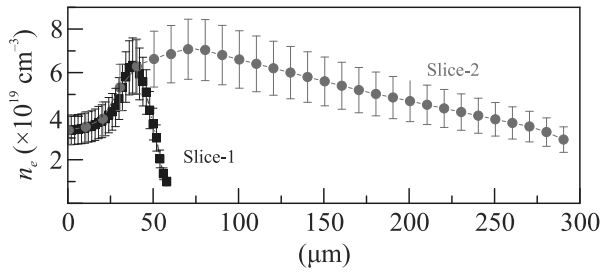


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределения электронной плотности, восстановленные вдоль срезов 1 и 2, проведенных на интерферограмме на рис. 3

дении пучка в собирающий объектив, что, возможно, обуславливает более резкие колебания интенсивности на тенеграмме, полученной спустя ≈ 3 нс после момента пробоя. Искровой канал, растущий от сферической плазменной области в прикатодной зоне, представляется относительно однородным, хотя имеется продольный градиент электронной плотности в направлении вершины канала. В среднем значения электронной плотности в развивающемся канале вдали от катода и сферической плазменной области составляют $(3-5) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, что близко к состоянию полностью диссоциированной и однократно ионизованной воздушной среды при нормальных условиях (что соответствует максимальной электронной плотности $5.4 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$). Данные значения восстановленной электронной плотности находятся в согласии с результатами современных работ, ведущимися в направлении исследования импульсных искровых разрядов [7, 20–22].

Таким образом, общая картина эволюции структуры растущего анодо-направленного искрового канала представляется следующим образом. Вначале сильноионизованная плазма с электронной плотностью не менее 10^{19} см^{-3} появляется в разряде в микромасштабах поверхности катода и начинает быстро расширяться. В виду, вероятно, достаточно высокой температуры и степени ионизации среды в области возникновения первичной сильноионизованной плазмы расширение катодного пятна носит взрывной характер и происходит во все направления в течение порядка первой наносекунды после момента пробоя промежутка. В результате в прикатодной зоне зарождается сферическая плазменная область с крайне резкими градиентами электронной плотности. Можно предположить, что частично выброшенный ионизованный материал катода содержится в оболочке сферической области, что объясняет наблюдаемые в ней высокие значения электронной плотности. Поскольку подпитка разряда продол-

жается поступающим на промежуток высоковольтным импульсом, в районе оболочки сферической области создаются условия для формирования мощного фронта ионизации, который начинает распространяться в сторону анода и прокладывает путь развития последующего искрового канала. При этом с точки зрения интенсивности развития распространяющийся мощный фронт ионизации опережает темп расширения сферической плазменной области вблизи катода. Как показывает статистика по выстрелам, сферическая плазменная область наблюдается на протяжении долгого времени существования результирующего канала разряда и чем-то напоминает катодный факел, обсуждаемый в работе [23]. В выстреле, приведенном на рис. 3, не прослеживается внутренняя микроструктура, поскольку эффект искровой филаментации – дробление растущего искрового канала на отдельные микроканалы диаметром 10–20 мкм, еще не успел достаточно развиваться. Напротив, можно предположить, что в уже растущем канале могут присутствовать зародыши последующих микроканалов, однако их много, расположены они плотно друг относительно друга и многократно перекрываются. Из-за чего на изображении не удастся разрешить биения в профилях результирующего сдвига фазы, вносимого отдельными микроканалами в проходящее лазерное излучение. Отметим, что в некоторых выстрелах удавалось запечатлеть слабые колебания интенсивности (зоны ее ослабления и усиления) от микроканалов на тенеграмме в прикатодной зоне. При этом колебания интенсивности начинали прослеживаться практически сразу от оболочки сферической плазменной области в прикатодной зоне. Данный факт свидетельствует в пользу того, что условия для зарождения одиночных микроканалов могут достигаться уже на этапе перехода катодного пятна к распространяющемуся фронту мощной ионизации. Возможно, оболочка сферической плазменной области (имеющая резкий градиент электронной плотности) оказывается неустойчивой во время своего расширения, что сопровождается появлением множественных мелкомасштабных флуктуаций электронной плотности. Их пространственный масштаб определяется плазменной длиной волны $l_{pe} \approx 2\pi c/\omega_{pe} \sim 10-40$ мкм (где c – скорость света в вакууме, $\omega_{pe} = (4\pi n_e/m_e)^{1/2}$ – плазменная частота), оценка получена для характерных плотностей электронов $n_e \sim 10^{18}-10^{19} \text{ см}^{-3}$ на фронте расширяющейся плазменной области. Данная величина может определять масштаб первичных зон зарождения микроканалов, в которых их последующее развитие продолжится вследствие усиления ионизации

воздушной среды [21, 22], поддерживаемой большим потоком электронов с катода, сконцентрированным в узких поперечных областях пространства. Заметим, что к схожим результатам приводят рассматривания развития ионизационной неустойчивости на фронте расширяющегося искрового канала, проведенные авторами работы [11] с использованием модели неустойчивости поверхности растущего стримера. Высказанные предположения, однако, требуют последующего подтверждения в эксперименте. Данные, полученные в этом направлении, могут сыграть решающую роль в определении возможных моделей неустойчивостей в прикатодной плазме, способных создавать условия для развития микроструктуры электрической искры. Можно предположить, что определенного успеха здесь удастся добиться при переходе к зондированию лазерным излучением с длиной волны 1064 нм, поскольку в этом случае повышается чувствительность техники лазерной интерферометрии по отношению к просвечиваемой плазме.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств Российского научного фонда (грант # 24-79-10167).

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. I. Adamovich, S. Agarwal, E. Ahedo et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **55**, 373001 (2022).
2. N. Minesi, S.A. Stepanyan, P.B. Mariotto, G.-D. Stancu, and C.O. Laux, On the arc transition mechanism in nanosecond air discharges AIAA Scitech 2019 Forum AIAA SciTech Forum (San Diego, CA), American Institute of Aeronautics and Astronautics (2019); <https://doi.org/10.2514/6.2019-0463>.
3. R. A. Najaf-Zadeh, J. Phys. D: Appl. Phys. **87**, 3180 (2000).
4. R. van der Horst, T. Verreycken, E. van Veldhuizen, and P. Bruggeman, J. Phys. D: Appl. Phys. **45**, 345201 (2012).
5. D. Z. Pai, K. Ostrikov, S. Kumar, D.A. Lacoste, I. Levchenko, and C. O. Laux, Sci. Rep. **3**, 1221 (2013).
6. A. Lo, A. Cessou, C. Lacour, B. Lecordier, P. Boubert, D. Xu, C. Laux, and P. Vervisch, Plasma Sources Sci. Technol. **26**, 045012 (2017).
7. S. Shcherbanev, C. Ding, S. Starikovskaia, and N. Popov, Plasma Sources Sci. Technol. **28**, 065013 (2019).
8. K.I. Almazova, A.N. Belonogov, V.V. Borovkov, E. Gorelov, I. Morozov, A.A. Tren'kin, and S.Y. Kharitonov, Technical Physics **63**, 801 (2018).
9. A.A. Tren'kin, K.I. Almazova, A.N. Belonogov, V.V. Borovkov, E. Gorelov, I. Morozov, and S.Y. Kharitonov, Technical Physics **64**, 470 (2019).
10. E. Parkevich, M. Medvedev, G. Ivanenkov, A. Khirianova, A. Selyukov, A. Agafonov, P.A. Korneev, S. Gus'Kov, and A. Mingaleev, Plasma Sources Sci. Technol. **28**, 095003 (2019).
11. A. Tren'kin, K. Almazova, A. Belonogov, V. Borovkov, E. Gorelov, I. Morozov, and S.Y. Kharitonov, Technical Physics **68**, S613 (2023).
12. E. Parkevich, M. Medvedev, A. Selyukov, A. Khirianova, A. Mingaleev, S. Mishin, S. Pikuz, and A. Oginov, Optics and Lasers in Engineering **116**, 82 (2019).
13. J. Cl'rouin, P. Noiret, V.N. Korobenko, and A.D. Rakhel, Physical Review B – Condensed Matter and Materials Physics **78**, 224203 (2008).
14. S. Barengolts, G. Mesyats, and M. Tsventoukh, JETP **107**, 1039 (2008).
15. A. Khomkin and A. Shumikhin, JETP **125**, 1189 (2017).
16. K. Bockasten, JOSA **51**, 943 (1961).
17. E. Parkevich, A. Khirianova, T. Khirianov, K. Smaznova, D. Tolbukhin, V. Romanova, I. Kozin, and S. Ambrozevich, Phys. Rev E **109**, 055204 (2024).
18. E. Parkevich, A. Khirianova, T. Khirianov, D. Tolbukhin, Y. K. Bolotov, and S. Ambrozevich, Bull. Lebedev Phys. Inst. **50**, 540 (2023).
19. D. Xu, M. Shneider, D. Lacoste, and C. Laux, J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 235202 (2014).
20. N. Minesi, S. Stepanyan, P. Mariotto, G.D. Stancu, and C.O. Laux, Plasma Sources Sci. Technol. **29**, 085003 (2020).
21. N. Q. Minesi, P.B. Mariotto, E. Pannier, A. Vincent-Randonnier, G.D. Stancu, and C.O. Laux, Plasma Sources Sci. Technol. **32**, 044005 (2023).
22. B. Zhang, Y. Zhu, X. Zhang, N. Popov, T. Orrière, D. Z. Pai, and S.M. Starikovskaia, Plasma Sources Sci. Technol. **32**, 115014 (2023).
23. Ю.Д. Королев, Г.А. Месяц, *Физика импульсного пробоя газов*, Наука, М. (1991).

Фотовольтаический эффект Холла в двумерных флуктуирующих сверхпроводниках

М. В. Боев, В. М. Ковалев¹⁾

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Новосибирский государственный технический университет, 630073 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 9 августа 2024 г.

После переработки 28 августа 2024 г.

Принята к публикации 1 сентября 2024 г.

В работе обсуждается возможность существования фотовольтаического эффекта Холла – поперечного отклика двумерной системы со встроенным в плоскости системы постоянным тянущим электрическим полем – на внешнее циркулярно-поляризованное излучение вблизи точки фазового перехода системы в сверхпроводящее состояние со стороны нормальной фазы, $T > T_c$. Показано, что фотовольтаический эффект Холла может быть обусловлен сверхпроводящими флуктуациями в режиме, когда вклад в эффект нормальных электронов отсутствует.

DOI: 10.31857/S0370274X24100067, EDN: EZVBQA

1. Введение. Изучение стационарных токов носителей заряда в современных двумерных системах, индуцированных внешним высокочастотным полем, является активным направлением исследований в настоящее время [1]. В зависимости от симметрии двумерной системы, могут наблюдаться фотогальванические и фотовольтаические эффекты [2–13], эффекты фотонного увлечения носителей [14–16] и ряд других. В основе микроскопического описания таких явлений лежат симметричные свойства: отсутствие пространственной инверсии кристаллической решетки или самой структуры приводит к особенностям электрон-фотонного, электрон-фононного и электрон-электронного взаимодействий в самых различных системах [1–20]. Следует отметить, что указанные фотоиндуцированные транспортные эффекты изучаются как в полупроводниковых [2–16], так и в сверхпроводящих системах [21–26]. В случае изотропных (в плоскости) двумерных систем, указанные эффекты могут иметь место если пространственная инверсия нарушена встроенным стационарным тянущим электрическим полем $\mathbf{F}$, лежащим в плоскости двумерной системы. Среди большого разнообразия фотоиндуцированных транспортных эффектов особый интерес вызывает фотовольтаический эффект Холла (ФЭХ), заключающийся в появлении в поперечном к $\mathbf{F}$ направлении фотоиндуцированного тока. В случае внешнего циркулярно-поляризованного излучения, падающего по нормали к плоскости дву-

мерной системы, плотность стационарного тока ФЭХ может быть записана в виде (рис. 1)

$$\mathbf{j} = i\gamma[\mathbf{F} \times [\mathbf{E} \times \mathbf{E}^*]], \quad (1)$$

где $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} \exp(-i\omega t) + \mathbf{E}^* \exp(i\omega t)$ – электрическое поле внешнего циркулярно-поляризованного излучения в плоскости двумерной системы, γ – частотно-зависимый коэффициент, величина которого определяется конкретным микроскопическим механизмом эффекта. В случае сверхпроводящих систем, аналогом встроенного поля $\mathbf{F}$ является встроенный в систему сверхток. Теория ФЭХ недавно была разрабо-

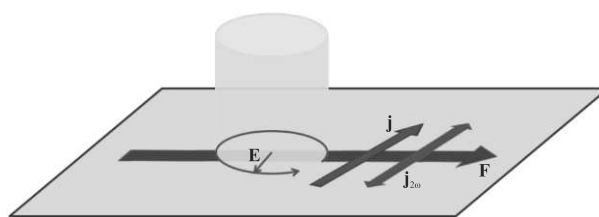


Рис. 1. (Цветной онлайн) Стационарный ($\mathbf{j}$) и переменный ($\mathbf{j}_{2\omega}$) фотовольтаический эффект Холла как отклик на циркулярное-поляризованное внешнее излучение

тана применительно к полупроводниковым двумерным системам с линейным и квадратичным спектром носителей заряда [27]. Одним из ключевых выводов разработанной теории является факт отсутствия циркулярного ФЭХ в случае, когда время релаксации импульса частицы не зависит от энергии частицы. Такая ситуация возникает для двумерных систем

¹⁾e-mail: vadimkovalev@isp.nsc.ru

с параболическим спектром носителей заряда: время релаксации импульса, описывающее процессы рассеяния носителей на короткодействующих примесных центрах, не зависит от их энергии (в случае линейной дисперсии двумерных носителей заряда, время релаксации импульса зависит от энергии даже в случае короткодействующих примесей). Применительно к сверхпроводящим системам, теория ФЭХ, описываемого выражением (1), была построена в работе [28]. Было показано, что ниже критической температуры, $T < T_c$, эффект имеет место вследствие того, что плотность состояний вблизи уровня Ферми сильно перестраивается при спаривании электронов, приводя к специфической зависимости времени релаксации импульса квазичастиц сверхпроводника от их энергии даже в случае параболической дисперсии и короткодействующих рассеивающих центров. В точке фазового перехода $T = T_c$ плотность тока ФЭХ обращается в ноль, что согласуется с теорией ФЭХ для нормальных электронов в работе [27].

Цель настоящего сообщения заключается в том, чтобы теоретически показать возможность существования циркулярного ФЭХ выше T_c для системы нормальных электронов с независимым от энергии временем релаксации импульса. Если двумерная система может испытывать фазовый переход в сверхпроводящее состояние, то ФЭХ, описываемый выражением (1), может быть обусловлен наличием флуктуирующих куперовских пар вблизи T_c при $T > T_c$, даже если вклад нормальных электронов отсутствует. Следует отметить, что, в отличие от парапроводимости, когда сверхпроводящие флуктуации дают лишь поправку к друдевской проводимости [29], в случае ФЭХ сверхпроводящие флуктуации могут давать вклад в основной эффект на фоне нулевого вклада нормальных электронов.

Еще одним родственным эффектом, представляющим интерес в современной литературе, является переменный ФЭХ (*ac* Hall effect), когда поперечный к $\mathbf{F}$ (в случае сверхпроводников – поперечный к встроенному стационарному сверхтоку) фотоиндуцированный ток осциллирует на удвоенной частоте внешнего излучения – явление, фактически представляющее собой эффект генерации второй гармоники [1, 30–32]. В настоящем сообщении будет также изучен и переменный ФЭХ, обусловленный сверхпроводящими флуктуациями.

Теоретическое описание вклада сверхпроводящих флуктуаций в транспортные свойства сверхпроводников основывается либо на использовании временных уравнений Гинзбурга–Ландау, либо на использовании методов диаграммной техники [29]. В насто-

ящем кратком сообщении мы воспользуемся иным подходом, предложенным Асламазовым и Ларкиным, и базирующемся на использовании кинетического уравнения, аналогичному уравнению Больцмана для нормальных электронов [29, 33]. Благодаря простоте такого подхода, он часто используется для описания высокочастотных откликов сверхпроводящих флуктуаций [21, 34–37].

2. Флуктуационный ФЭХ. Согласно подходу Асламазова и Ларкина, вклад флуктуаций определяется решением уравнения Больцмана для функции распределения флуктуаций

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{f - f_0}{\tau_p} + 2e(\mathbf{F} + \mathbf{E}(t)) \cdot \nabla_p f = 0. \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^*e^{i\omega t}$ – вектор напряженности электромагнитной волны, падающей нормально на двумерную систему и оказывающей силовое воздействие на сверхпроводящие куперовские пары, несущие заряд $2e$. Равновесное состояние сверхпроводящих флуктуаций описывается функцией распределения Релея–Джинса, $f_0 = T/(\varepsilon_p + \mu)$, где $\mu = \alpha T_c \epsilon$, $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ – приведенная температура, $\varepsilon_p = p^2/4m$. Отметим, что здесь и далее температура в энергетических единицах и $\hbar = 1$. Параметр α уравнения Гинзбурга–Ландау выражается через длину когерентности ξ посредством соотношения $4m\alpha T_c \xi^2 = 1$, где

$$\xi^2 = \frac{v_F^2 \tau^2}{2} \left[\psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4\pi T \tau}\right) + \frac{\psi'(1/2)}{4\pi T \tau} \right] \quad (3)$$

и $\psi(x)$ – дигамма-функция. Эффективное время жизни куперовских пар, как и их равновесная функция распределения, выражается через кинетическую энергию центра масс куперовской пары $\varepsilon_p + \mu$ как $\tau_p = \pi\alpha/(16(\varepsilon_p + \mu))$. Данное обстоятельство является ключевым для флуктуационного механизма ФЭХ, обсуждаемого в настоящей работе: даже если время релаксации импульса τ нормальных электронов не зависит от их энергии, время жизни флуктуирующих куперовских пар τ_p , определяющих ток ФЭХ, зависит от кинетической энергии пары.

В выражение (3) входит фермиевская скорость нормальных электронов, v_F , и время релаксации импульса нормальных электронов на примесях $\tau = \text{const}$. Для нахождения стационарного тока, ищем решение уравнения (2) итерациями по сумме полей $\mathbf{F} + \mathbf{E}(t)$. В результате, в первом порядке поправка

к функции распределения содержит стационарный и переменный вклады, $f_1 = \bar{f}_1 + \tilde{f}_1(t)$, где

$$\bar{f}_1 = -(2e)\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0, \quad (4)$$

$$\tilde{f}_1(t) = -(2e)\left[\tau_{\omega}e^{-i\omega t}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0 + \tau_{\omega}^*e^{i\omega t}(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0\right],$$

и $\tau_{\omega} = \tau_{\mathbf{p}}(1 - i\omega\tau_{\mathbf{p}})^{-1}$. Во втором порядке $f_2 = \bar{f}_2 + \tilde{f}_2e^{-i\omega t} + \tilde{f}_2^*e^{i\omega t}$ (поправки на удвоенной частоте не дают вклад в стационарный ток)

$$\bar{f}_2 = (2e)^2\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\omega}^*(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] + \quad (5)$$

$$+ (2e)^2\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\omega}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0],$$

$$\tilde{f}_2 = (2e)^2\tau_{\omega}(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\omega}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] +$$

$$+ (2e)^2\tau_{\omega}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0],$$

$$\tilde{f}_2^* = (2e)^2\tau_{\omega}^*(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\omega}^*(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] +$$

$$+ (2e)^2\tau_{\omega}^*(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})[\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0].$$

Полный ток, обусловленный сверхпроводящими флуктуациями, определяется стационарной поправкой третьего порядка

$$\mathbf{j} = (2e) \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \bar{f}_3, \quad (6)$$

$$\bar{f}_3 = -(2e)\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})\bar{f}_2$$

$$-(2e)\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})\tilde{f}_2^* - (2e)\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})\tilde{f}_2.$$

Это выражение может быть преобразовано к виду, более удобному для дальнейших вычислений. Интегрируя один раз по частям, плотность тока может быть выражена через поправки второго порядка к функции распределения

$$\mathbf{j} = (2e)^2 \sum_{\mathbf{p}} \left[\bar{f}_2(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) + \tilde{f}_2(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) + \right. \quad (7)$$

$$\left. + \tilde{f}_2^*(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \right] (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}}).$$

Первый член здесь не дает вклада в циркулярный ток. Подставляя во второе и третье слагаемые в (7) выражения (5) и интегрируя еще раз по частям, получаем для тока общее выражение следующего вида

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & -(2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} \tau_{\omega} [(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_{\omega} (\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}}) \\ & - (2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}} [(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_{\omega} (\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}}) \\ & - (2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} \tau_{\omega}^* [(\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_{\omega}^* (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}}) \\ & - (2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}} [(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}})f_0] (\mathbf{E}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_{\omega}^* (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}}). \end{aligned} \quad (8)$$

Выбирая направление постоянного поля вдоль оси x , $\mathbf{F} = (F_x, 0)$, можно убедиться, что в случае циркулярно-поляризованного излучения второе и четвертое слагаемые в (8) не дают вклада в выражение (1). Анализ оставшихся слагаемых в случае циркулярно-поляризованного излучения приводит к следующему выражению для плотности тока

$$j_y = -\frac{(2e)^4}{(2m)^2} \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} [\tau_{\omega}(\tau_{\omega})' - \tau_{\omega}^*(\tau_{\omega}^*)'] \varepsilon_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}} f_0' \times (E_x E_y^* - E_x^* E_y) F_x, \quad (9)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/4m = m\mathbf{v}_{\mathbf{p}}^2$ и штрих означает взятие производной по энергии $\varepsilon_{\mathbf{p}}$. Сравнение выражения (9) с (1) дает для коэффициента γ выражение (восстанавливаем $\hbar$ для размерности)

$$\gamma = \frac{2(2e)^4}{(2m)^2} \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^2} \left(\frac{\omega \tau_{\mathbf{p}}^3}{(1 + \omega^2 \tau_{\mathbf{p}}^2)^2} \right)' \varepsilon_{\mathbf{p}} \tau_{\mathbf{p}} f_0'. \quad (10)$$

Интеграл в этом выражения удобно переписать в безразмерном виде

$$\gamma = \frac{(2e)^4}{2\pi} \left(\frac{\pi\alpha}{16} \right)^3 \left(\frac{T_c \hbar}{2m\mu^4} \right) \int_0^{\infty} \frac{2a_{\omega}(1-2x)dx}{(1+x)^3 [a_{\omega}^2 + (1+x)^2]^2}, \quad (11)$$

где $a_{\omega} = \pi\alpha\hbar\omega/16\mu$. Теперь в (11) удобно рассмотреть предельные случаи. В области низких частот, $a_{\omega} \ll 1$, легко находим

$$\gamma = \frac{(2e)^4}{20\pi} \left(\frac{\pi\alpha}{16} \right)^3 \left(\frac{T_c \hbar}{m\mu^4} \right) a_{\omega} \sim \frac{\omega}{(T - T_c)^5}, \quad (12)$$

а в области высоких частот, $a_{\omega} \gg 1$, получаем

$$\gamma = -\frac{(2e)^4}{2\pi} \left(\frac{\pi\alpha}{16} \right)^3 \left(\frac{T_c \hbar}{m\mu^4} \right) \frac{1}{2a_{\omega}^3} \sim \frac{-1}{\omega(T - T_c)}. \quad (13)$$

Интеграл в (11) можно вычислить в общем случае, но финальное аналитическое выражение достаточно громоздко, поэтому соответствующее поведение $\gamma(\omega)$ удобнее представить в виде графика, рис. 2. Отметим высокую степень сингулярности по приведенной температуре в (12) и смену знака тока с ростом частоты.

3. Флуктуационный ас ФЭХ. В настоящем разделе рассмотрим переменный ФЭХ, представляющий собой переменный поперечный к $\mathbf{F}$ ток на удвоенной частоте падающего циркулярно-поляризованного излучения, $\mathbf{j}(t) = \mathbf{j}^{(2\omega)} \exp(-2i\omega t) + \mathbf{j}^{(2\omega)*} \exp(2i\omega t)$. Общее феноменологическое выражение для переменного ФЭХ имеет вид

$$\mathbf{j}(t) = \{\alpha \mathbf{F}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) + \beta \mathbf{E}(\mathbf{F} \cdot \mathbf{E})\} e^{-2i\omega t} + \text{c.c.} \quad (14)$$

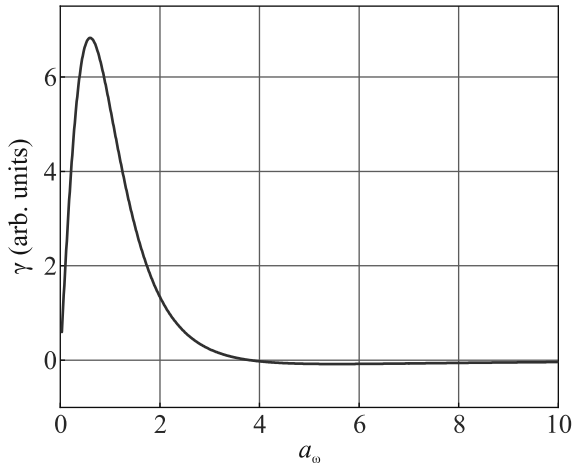


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость плотности тока ФЭХ от параметра a_ω

Для расчета эффекта генерации второй гармоники, определяемого переменным током, требуются поправки второго и третьего порядка к функции распределения на удвоенной частоте внешнего излучения. Стандартным образом, изложенным в предыдущей секции, находим

$$\begin{aligned}\tilde{f}_2^{(2\omega)} &= (2e)^2 \tau_{2\omega} (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_\omega (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) f_0, \\ \tilde{f}_3^{(2\omega)} &= -(2e) \tau_{2\omega} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tilde{f}_2^{(2\omega)} - (2e) \tau_{2\omega} (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tilde{f}_2,\end{aligned}\quad (15)$$

и для амплитуды тока получаем выражение

$$\begin{aligned}\mathbf{j}^{(2\omega)} &= (2e) \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tilde{f}_3^{(2\omega)} = \\ &= (2e)^2 \sum_{\mathbf{p}} \left[\tilde{f}_2^{(2\omega)} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) + \tilde{f}_2 (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \right] (\mathbf{v} \tau_{2\omega}).\end{aligned}\quad (16)$$

После подстановки (15) в (16) и интегрирования по частям, амплитуда тока принимает вид

$$\begin{aligned}\mathbf{j}^{(2\omega)} &= -(2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} [\tau_{\mathbf{p}} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) f_0] (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_\omega (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) (\mathbf{v} \tau_{2\omega}) \\ &\quad - (2e)^4 \sum_{\mathbf{p}} [\tau_\omega (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) f_0] \left[(\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_\omega (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) + \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \tau_{2\omega} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}}) \right] (\mathbf{v} \tau_{2\omega}).\end{aligned}\quad (17)$$

Это выражение применимо при любой поляризации излучения. В случае циркулярно-поляризованного излучения анализ (17) приводит к следующему выражению для амплитуды холловской компоненты переменного тока

$$\begin{aligned}j_y^{(2\omega)} &= -\frac{(2e)^4}{(2m)^2} E_y (\mathbf{F} \cdot \mathbf{E}) \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^2} f'_0 \varepsilon_{\mathbf{p}} \\ &\quad \left[(\tau_{\mathbf{p}} + \tau_\omega) [\tau_\omega \tau'_{2\omega} + (\tau_\omega \tau_{2\omega})' + \varepsilon_{\mathbf{p}} (\tau_\omega \tau'_{2\omega})'] + \right. \\ &\quad \left. + \tau_\omega [2\tau_{2\omega} \tau'_{2\omega} + \varepsilon_{\mathbf{p}} (\tau_{2\omega} \tau'_{2\omega})'] \right],\end{aligned}\quad (18)$$

где $\tau_{2\omega} = \tau_{\mathbf{p}} (1 - 2i\omega \tau_{\mathbf{p}})^{-1}$. Величина амплитуды тока (18) является комплекснозначной величиной. Сравнивая это выражение с (14) находим соответствующий коэффициент

$$\begin{aligned}\beta &= -\frac{(2e)^4}{2\pi 2m} \int_0^\infty d\varepsilon f'_0 \left\{ \varepsilon (\tau_\varepsilon + \tau_\omega) [\tau_\omega (\varepsilon \tau_{2\omega})']' \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tau_\omega}{2} [\varepsilon^2 (\tau_{2\omega}^2)']' \right\}.\end{aligned}\quad (19)$$

Зависимости величин $\text{Re} \beta$ и $\text{Im} \beta$ от частоты циркулярно-поляризованного излучения представлены на рис. 3.

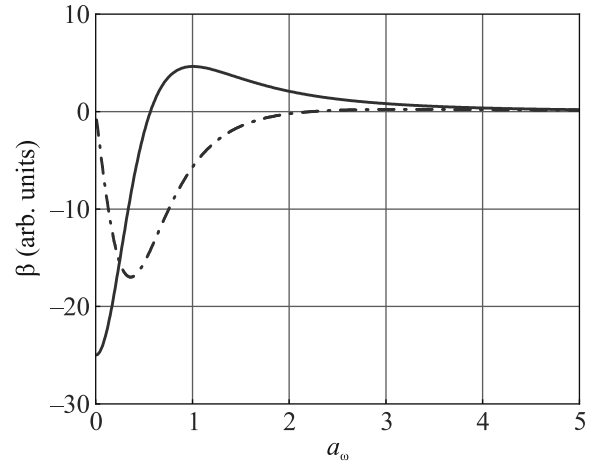


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости $\text{Re} \beta$ и $\text{Im} \beta$ от частоты циркулярно-поляризованного внешнего излучения (сплошная и штрихпунктирная кривые соответственно)

Закключение. В настоящем сообщении было показано, что фотовольтаический эффект Холла, индуцированный циркулярно-поляризованным излучением, может иметь место в двумерных системах даже в режиме, когда вклад нормальных электронов отсутствует. В этом случае ФЭХ может быть обусловлен сверхпроводящими флуктуациями вблизи точки перехода двумерной системы в сверхпроводящее состояние.

Авторы благодарят О. В. Кибиса за обсуждение результатов и полезные замечания.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект #FSUN-2023-0006) и Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

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

1. M. M. Glazov and S. D. Ganichev, Phys. Rep. **535**, 101 (2014).
2. V. I. Belinicher and B. I. Sturman, Sov. Phys.-Uspekhi **23**, 199 (1980).
3. E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Problemy Sovremennoi Fiziki*, Nauka, Leningrad (1980).
4. S. D. Ganichev and W. Prettl, *Intense Terahertz Excitation of Semiconductors*, Oxford University Press, Oxford (2006).
5. L. E. Golub, S. A. Tarasenko, M. V. Entin, and L. I. Magarill, Phys. Rev. B **84**, 195408 (2011).
6. M. V. Entin, L. I. Magarill and V. M. Kovalev, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 325302 (2019).
7. E. Deyo, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, and B. Spivak, arXiv:0904.1917 (2009).
8. N. V. Leppenen and L. E. Golub, Phys. Rev. B **107**, L161403 (2023).
9. L. E. Golub and M. M. Phys. Rev. B **106**, 205205 (2022).
10. L. E. Golub, E. L. Ivchenko, and B. Spivak, Phys. Rev. B **102**, 085202 (2020).
11. M. V. Entin and V. M. Kovalev, Phys. Rev. B **104**, 075424 (2021).
12. A. V. Snegirev, V. M. Kovalev, and M. V. Entin, Phys. Rev. B **107**, 085415 (2023).
13. A. V. Snegirev, V. M. Kovalev, and M. V. Entin, Phys. Rev. B **109**, 085422 (2024).
14. J. Karch, P. Olbrich, M. Schmalzbauer et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **105**, 227402 (2010).
15. M. V. Entin, L. I. Magarill, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **81**, 165441 (2010).
16. P. A. Obratsov, N. Kanda, K. Konishi, M. Kuwata-Gonokami, S. V. Garnov, A. N. Obratsov, and Y. P. Svirko, Phys. Rev. B **90**, 241416(R) (2014).
17. O. V. Kibis, Phys. Lett. A **166**, 393 (1992).
18. O. V. Kibis, JETP **88**, 527 (1999).
19. O. V. Kibis, Phys. Solid State **43**, 2336 (2001).
20. O. V. Kibis, Physica E **12**, 741 (2002).
21. V. M. Kovalev, K. Sonowal, and I. G. Savenko, Phys. Rev. B **103**, 024513 (2021).
22. A. V. Parafilo, M. V. Boev, V. M. Kovalev, and I. G. Savenko, Phys. Rev. B **106**, 144502 (2022).
23. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, Appl. Phys. Lett. **124**, 252601 (2024).
24. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B **109**, L220503 (2024).
25. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. Lett. **132**, 096001 (2024).
26. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, I. D. Tokman, V. Vadimov, B. Lounis, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. Lett. **126**, 137002 (2021).
27. M. V. Durnev, Phys. Rev. B **104**, 085306 (2021).
28. A. V. Parafilo, V. M. Kovalev, and I. G. Savenko, Phys. Rev. B **108**, L180509 (2023).
29. A. I. Larkin and A. A. Varlamov, *Theory of Fluctuations in Superconductors*, Oxford University Press, Oxford (2005).
30. L. E. Golub and S. A. Tarasenko, Phys. Rev. B **90**, 201402(R) (2014).
31. M. V. Boev and V. M. Kovalev, JETP Lett. **116**, 173 (2022).
32. K. Sonowal, A. V. Parafilo, M. V. Boev, V. M. Kovalev, and I. G. Savenko, 2D Materials **10**, 045004 (2023).
33. L. G. Aslamazov and A. I. Larkin, in *Proceedings of the First European conference on condensed matter, European Physical Society*, Geneva, Switzerland (1971).
34. T. Mishonov and D. Damianov, Czech. J. Phys. **46**, 631 (1996).
35. D. Damianov and T. Mishonov, Superlat. Microstr. **21**, 467 (1997).
36. T. M. Mishonov, A. I. Posazhennikova, and J. O. Indekeu, Phys. Rev. B **65**, 064519 (2002).
37. T. M. Mishonov, G. V. Pachov, I. N. Genchev, L. A. Atanasova, and D. Ch. Damianov, Phys. Rev. B **68**, 054525 (2003).

Квантовые эффекты при спин-флоп переходе в топологическом антиферромагнитном изоляторе MnBi_2Te_4

В. В. Вальков¹⁾, А. О. Злотников, А. Гамов, Н. А. Федорова, Ф. Н. Томили

Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 14 августа 2024 г.

После переработки 29 августа 2024 г.

Принята к публикации 29 августа 2024 г.

Показано, что экспериментально обнаруженные особенности низкотемпературного поведения намагниченности во внешнем магнитном поле, ориентированном перпендикулярно слоям ионов марганца топологического антиферромагнетика MnBi_2Te_4 , обусловлены квантовыми эффектами, индуцированными недиагональным характером тригональной компоненты кристаллического поля. При этом аномальное возрастание намагниченности материала до спин-флоп перехода, а также после него в фазе “схлопнутых” подрешеток объясняется подавлением вкладов от квантовых эффектов. Сопоставление результатов теоретического анализа с данными эксперимента позволило уточнить параметры эффективной спиновой модели MnBi_2Te_4 и установить важную роль отмеченной тригональной компоненты.

DOI: 10.31857/S0370274X24100072, EDN: ALJRJW

1. Введение. Существование ниже температуры Нееля $T_N = 24.5$ К антиферромагнитного (АФМ) порядка в топологическом изоляторе (ТИ) MnBi_2Te_4 [1–5] определило повышенный интерес к этому слоистому ван-дер-ваальсовому материалу, поскольку позволило воздействовать на топологически защищенные поверхностные состояния через магнитную структуру.

Магнитное упорядочение в MnBi_2Te_4 соответствует антиферромагнетизму А типа, при котором магнитные моменты ионов Mn^{2+} в пределах одного слоя образуют ферромагнитную (ФМ) структуру, тогда как в соседних плоскостях эти моменты ориентированы антипараллельно. Важная особенность магнитных свойств MnBi_2Te_4 обусловлена сильной одноионной анизотропией (ОА), в соответствие с которой магнитные моменты ионов Mn ориентированы перпендикулярно слоям. Отмеченные факты подтверждаются данными нейтронного рассеяния [6, 7]. При этом как магнитные, так и спектральные свойства MnBi_2Te_4 могут отличаться для разных образцов [8]. Например, в некоторых образцах [9, 10] обнаружено формирование ферромагнитного порядка при $T < T_N$ на поверхности MnBi_2Te_4 .

Вызывает интерес механизм формирования ферромагнетизма в слоях Mn, который не объясняется прямым гейзенберговским обменом. Различные оценки по правилу Гуденафа–Канамори–Андерсона

предполагают формирование либо слабого АФМ обмена, либо ФМ обмена между ионами Mn в одном слое через лиганды Te^{2-} [11, 12]. Первопринципные расчеты обменных параметров в MnBi_2Te_4 подтверждают реализацию ФМ обмена величиной 0.09 мэВ между ближайшими ионами Mn в слое [2]. Однако единый взгляд на причину ферромагнетизма отсутствует и исследования в данном направлении продолжаются. В работе [12] было показано, что гибридизация p -состояний ионов Bi^{3+} с p -состояниями лиганда Te^{2-} может инициировать ФМ сверхобмен между ионами Mn. Отмечалось также, что ферромагнитная связь между магнитными моментами ионов Mn, находящихся в одном слое, может быть обусловлена кинематическим взаимодействием между фермионами Хаббарда, отражающими поведение сильно коррелированной подсистемы $3d$ -электронов Mn^{2+} [13]. При этом АФМ обмен внутри слоя и между слоями ионов Mn^{2+} возникает по механизму Андерсона.

Проблемным остается вопрос о возникновении ОА в MnBi_2Te_4 , поскольку для электронной конфигурации $3d^5$ иона марганца и $S = 5/2$ орбитальный момент $L = 0$. Один из механизмов индуцирования ОА может быть связан с виртуальным подмешиванием других электронных конфигураций. В работе [11] показано, что для появления ОА важным является учет спин-орбитального взаимодействия в ионах Te.

По своим свойствам MnBi_2Te_4 напоминает АФМ с ОА типа “легкая ось”, ориентированной перпенди-

¹⁾e-mail: vvv@iph.krasn.ru

кулярно слоям ионов марганца (ось c). Эта анизотропия стабилизирует коллинеарную АФМ структуру (в дальнейшем фаза I) в магнитном поле H , направленном вдоль оси c , вплоть до поля спин-флоп перехода $H_{sf} = 3.7$ Тл, когда происходит “опрокидывание” магнитных подрешеток [2, 6, 14, 15] с формированием скошенной фазы II. В этой фазе увеличение H приводит к уменьшению угла наклона векторов намагниченностей подрешеток по отношению к оси c . Когда H достигает поля насыщения $H_{sat}^c = 8.1$ Тл намагниченности обеих подрешеток ориентированы вдоль оси c (фаза III).

В магнитном поле, лежащем в плоскости ионов марганца, скос подрешеток происходит сразу, а их “схлопывание” при поле насыщения $H_{sat}^{ab} = 10.9$ Тл.

Для описания эволюции магнитной структуры и оценке обменных параметров по величинам характеристических полей использовался феноменологический подход [7, 11, 15]. Однако часть данных не согласовывалась с феноменологическими результатами. Прежде всего это относилось к поведению намагниченности M при $T \ll T_N$, когда в фазе I M увеличивалась с ростом H , тогда как по феноменологической теории $M = 0$. Аналогичная проблема возникала в связи с наблюдаемым в фазе III парапроцессом.

В работе [15] последний факт связывался с наличием дефектов в системе, когда ионы Mn занимают позиции ионов Bi. При этом между ионами Mn в центральном слое MnBi_2Te_4 и “дефектными” ионами Mn устанавливается АФМ связь, в результате чего при понижении температуры в АФМ фазе также устанавливается дальний порядок в “дефектном” слое ионов Mn [15–17]. Действительно, учет отмеченных дефектов позволил объяснить нарастание намагниченности в фазе III при увеличении поля вплоть до 60 Тл [15]. Однако вопрос о росте намагниченности в полях, меньших поля спин-флоп перехода, оставался открытым.

Следует отметить, что в родственном соединении MnSb_2Te_4 перемешивание позиций ионов Mn и Sb может приводить к смене магнитной структуры с АФМ А типа на ФМ [16, 18]. В структурах с MnBi_2Te_4 , помимо “дефектных” ионов MnI в слое ионов Bi, обнаружены также ионы MnII в ван-дер-ваальсовой щели между семислойками [19]. При этом обменное взаимодействие этих ионов с ионами Mn в центральном слое различно – ФМ для MnI и АФМ для MnII.

Решение отмеченных вопросов составило предмет данной работы. В ней ключевая роль отводится квантовым эффектам, возникающим в анизотроп-

ных магнетиках с относительно низкими значениями температуры магнитного упорядочения.

Поскольку для кристаллографической структуры MnBi_2Te_4 внутренние поля соответствуют тригональной симметрии с точечной группой C_{3d} (S_6) для ионов Mn, то оператор ОА, кроме обычных одноосных слагаемых, содержит тригональную компоненту [20, 21]. Ее особенность обусловлена смешиванием состояний с разными значениями проекции спина. Это вызывает квантовые эффекты, отсутствующие при феноменологическом подходе.

Цель работы заключается в развитии теории, позволяющей при учете квантовых эффектов описать указанные выше аномалии в поведении низкотемпературной намагниченности. Для ее достижения использовано атомное представление [22] с привлечением диаграммной техники для операторов Хаббарда (ДТХ) [23, 24], в сущностной части отличающейся от стандартной техники для фермиевских или бозевских операторов [25] тем, что коммутация хаббардовских операторов может равняться не числу, а другому оператору Хаббарда. Это позволило вывести дисперсионное уравнение и получить его решение в низкотемпературной области при учете ренормировок от тригональной компоненты ОА (ТКОА). Определены критические поля и проанализировано поведение намагниченности материала во всех фазах при различных T . Сопоставление теоретических зависимостей $M(H)$ с данными эксперимента позволило получить дополнительные сведения о параметрах модели магнитной подсистемы MnBi_2Te_4 и сделать утверждение о существенной роли ТКОА.

2. Гамильтониан магнитной подсистемы.

Принимая во внимание сказанное во введении, гамильтониан магнитной подсистемы MnBi_2Te_4 запишем в виде

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\mathbf{S}_g \mathbf{S}_{g'}) + \quad (1) \\ + \sum_{fg} J_{fg} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g) + \sum_f [H_f^A - \mathbf{H} \mathbf{S}_f] + \sum_g [H_g^A - \mathbf{H} \mathbf{S}_g],$$

где индексы f и f' нумеруют узлы F -подрешетки, в которой без магнитного поля спины ориентированы вдоль оси Oz , а g и g' – узлы G -подрешетки, для которой ориентация спинов противоположна. Параметры $I_{ff'}$ и $I_{gg'}$ описывают интенсивность обменной связи между спинами из одной подрешетки, находящимися в пределах одного слоя, тогда как J_{fg} есть обменный интеграл для спинов из разных подрешеток. $\mathbf{S}_f$ и $\mathbf{S}_g$ – векторные операторы спина для узлов f и g соответственно, $\mathbf{H}$ – вектор магнитного поля,

величина которого измеряется в энергетических единицах: т.е. под H понимается произведение $g_L \mu_B H$, в котором g_L – фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора.

Оператор энергии ОА для F – подрешетки

$$H_f^A = -D_2(\hat{S}_f^z)^2 - D_4(\hat{S}_f^z)^4 + B\hat{\Omega}_{4f}^3 \quad (2)$$

в соответствие с кристаллической симметрией включает ТКОА с константой B , Ω_4^3 имеет следующую структуру [20] (индекс узла временно опущен)

$$\hat{\Omega}_4^3 = (\hat{O}_4^{+3} - \hat{O}_4^{-3})/2i, \quad \hat{O}_4^{\pm 3} = (\hat{S}^z \hat{S}^{\pm 3} + \hat{S}^{\pm 3} \hat{S}^z)/2, \\ \hat{S}^{\pm 3} = (\hat{S}^{\pm})^3, \quad \hat{S}^{\pm} = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y, \quad (3)$$

$\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$ – компоненты вектора оператора спина. H_g^A отличается от H_f^A только заменой индекса узла.

С феноменологической точки зрения положительные D_2 и D_4 задают интенсивности эффективных полей, ориентирующих спины либо по, либо против направления оси Oz . При отрицательных D_2 и D_4 эффективные поля стремятся упорядочить спины перпендикулярно оси Oz . Константа B задает интенсивность эффективного поля анизотропии, соответствующего второй оси (двуосный кристалл).

При квантовом подходе параметры ОА соответствуют амплитудам квадрупольных и октупольных полей, действующих на спины, и возникающие в результате совместного влияния кристаллического поля и спин-орбитального взаимодействия.

3. Атомное представление, одноузельные состояния и уравнения самосогласования. Поскольку температура магнитного упорядочения в MnBi_2Te_4 мала ($T_N \simeq 24$ К), то характерная энергия ОА может стать соизмеримой с энергией обменной связи. В этих условиях динамика магнитной подсистемы определяется не только дипольными моментами, но и динамикой высших мультиполей. Для описания таких систем используется расширенный базис, учитывающий наличие степеней свободы, связанных как со спиновыми операторами, так и с их допустимыми произведениями.

В наиболее общем виде такая программа реализуется посредством перехода к атомному представлению, в котором динамическими переменными становятся операторы группы $U(N)$. С этой целью вводятся состояния $|\Psi_f^F\rangle$ и $|\Psi_g^G\rangle$, определяемые решениями уравнений Шредингера

$$(H_f^A - \bar{\mathbf{H}}_F \mathbf{S}_f) |\Psi_{nf}^F\rangle = E_n^F |\Psi_{nf}^F\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, 6, \quad (4)$$

$$(H_g^A - \bar{\mathbf{H}}_G \mathbf{S}_g) |\Psi_{ng}^G\rangle = E_n^G |\Psi_{ng}^G\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, 6, \quad (5)$$

в которых векторы самосогласованных полей

$$\bar{\mathbf{H}}_F = \mathbf{H} + I_0 \boldsymbol{\sigma}_F - J_0 \boldsymbol{\sigma}_G, \quad \bar{\mathbf{H}}_G = \mathbf{H} + I_0 \boldsymbol{\sigma}_G - J_0 \boldsymbol{\sigma}_F \quad (6)$$

зависят от значений равновесных средних $\boldsymbol{\sigma}_F = \langle \mathbf{S}_f \rangle$, $\boldsymbol{\sigma}_G = \langle \mathbf{S}_g \rangle$ для двух подрешеток. I_0 и J_0 – фурье-образы обменных интегралов $I_{ff'}$ и J_{fg} при нулевом значении квазиимпульса.

Равновесные средние удовлетворяют уравнениям:

$$\boldsymbol{\sigma}_F = \sum_{n=1}^6 \langle \Psi_n^F | \mathbf{S}_f | \Psi_n^F \rangle \exp(-E_n^F/T) / Z_F, \\ \boldsymbol{\sigma}_G = \sum_{n=1}^6 \langle \Psi_n^G | \mathbf{S}_g | \Psi_n^G \rangle \exp(-E_n^G/T) / Z_G, \quad (7)$$

$$Z_F = \sum_{n=1}^6 \exp(-E_n^F/T), \quad Z_G = \sum_{n=1}^6 \exp(-E_n^G/T).$$

Приведенные выражения (4)–(7) образуют замкнутую систему уравнений самосогласования, определяющую необходимые термодинамические средние.

Если одноузельные состояния (ОС) $|\Psi_{nf}^F\rangle$ и $|\Psi_{ng}^G\rangle$ рассматривать в качестве базисных векторов гильбертова пространства, то переход к атомному представлению осуществляется посредством введения операторов Хаббарда (ОХ) [22]:

$$X_f^{np} = |\Psi_{nf}^F\rangle \langle \Psi_{pf}^F|, \quad X_g^{mq} = |\Psi_{mg}^G\rangle \langle \Psi_{qg}^G|, \quad (8)$$

которые выступают в роли новых динамических переменных, с помощью которых описывается динамика не только дипольных степеней свободы, но и динамика высших мультиполей. Связь спиновых операторов с новыми переменными записывается в виде:

$$S_f^+ = \sum_{np} \gamma_{np}^F X_f^{np} \longrightarrow \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^F X_f^{\alpha}, \quad (9)$$

где во второй сумме, для краткости, пара индексов обозначена через α . Параметры представления вычисляются как матричные элементы:

$$\gamma_{np}^F = \langle \Psi_{nf}^F | S_f^+ | \Psi_{pf}^F \rangle. \quad (10)$$

Аналогичным образом записываются представления для других операторов

$$S_f^z = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu}^F X_f^{\mu}, \quad S_g^+ = \sum_{\beta} \gamma_{\beta}^G X_g^{\beta}, \quad S_g^z = \sum_{\nu} \Gamma_{\nu}^G X_g^{\nu}. \quad (11)$$

В новых переменных гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \sum_{fn} E_n^F X_f^{nn} + \sum_{gm} E_m^G X_g^{mm} + H_{\text{int}}, \quad (12)$$

в котором H_{int} получается из операторов, соответствующих обменным взаимодействиям, после подстановки в них представлений для спиновых операторов (9) и (11). Гамильтониан в форме (12) позволяет использовать диаграммную технику для операторов Хаббарда (ДТХ) [23, 24].

4. ОС и энергии в коллинеарной геометрии.

При ориентации магнитного поля вдоль тригональной оси в фазе I ОС для F -подрешетки имеют вид (индекс узла f опускаем):

$$\begin{aligned} |\Psi_1^F\rangle &= \cos \alpha_+ |5/2\rangle + i \sin \alpha_+ | -1/2\rangle, \\ |\Psi_2^F\rangle &= |3/2\rangle, \quad |\Psi_5^F\rangle = | -3/2\rangle, \\ |\Psi_3^F\rangle &= \cos \alpha_- |1/2\rangle + i \sin \alpha_- | -5/2\rangle, \\ |\Psi_4^F\rangle &= i \sin \alpha_+ |5/2\rangle + \cos \alpha_+ | -1/2\rangle, \\ |\Psi_6^F\rangle &= i \sin \alpha_- |1/2\rangle + \cos \alpha_- | -5/2\rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

где $|m\rangle$, ($m = 5/2, 3/2, \dots, -5/2$) собственные состояния оператора $\hat{S}^z$ для спина $S = 5/2$,

$$\begin{aligned} \cos \alpha_{\pm} &= \sqrt{\frac{1 + \delta_{\pm}}{2}}, \quad \sin \alpha_{\pm} = \mp \frac{V}{|V|} \sqrt{\frac{1 - \delta_{\pm}}{2}}, \\ \delta_{\pm} &= \frac{\Delta_{\pm}}{\sqrt{\Delta_{\pm}^2 + V^2}}, \quad \Delta_{\pm} = [3\bar{H}_F \pm (6D_2 + 39D_4)]/2, \\ \bar{H}_F &= H + I_0\sigma_F - J_0\sigma_G, \quad V = 3\sqrt{10}B. \end{aligned} \quad (14)$$

ОС (13) соответствуют собственные энергии:

$$\begin{aligned} E_{1,4}^F &= (\varepsilon_4^F + \varepsilon_1^F)/2 \mp \sqrt{\Delta_+^2 + V^2}, \quad E_2^F = \varepsilon_2^F, \\ E_{3,6}^F &= (\varepsilon_6^F + \varepsilon_3^F)/2 \mp \sqrt{\Delta_-^2 + V^2}, \quad E_5^F = \varepsilon_5^F, \\ \varepsilon_n^F &= -\bar{H}_F(7/2 - n) - D_2(7/2 - n)^2 - D_4(7/2 - n)^4. \end{aligned} \quad (15)$$

Для G -подрешетки структура ОС аналогична:

$$\begin{aligned} |\Psi_1^G\rangle &= \cos \beta_+ | -5/2\rangle - i \sin \beta_+ | +1/2\rangle, \\ |\Psi_2^G\rangle &= | -3/2\rangle, \quad |\Psi_5^G\rangle = | +3/2\rangle, \\ |\Psi_3^G\rangle &= \cos \beta_- | -1/2\rangle + i \sin \beta_- | +5/2\rangle, \\ |\Psi_4^G\rangle &= -i \sin \beta_+ | -5/2\rangle + \cos \beta_+ | +1/2\rangle, \\ |\Psi_6^G\rangle &= i \sin \beta_- | -1/2\rangle + \cos \beta_- | +5/2\rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} \cos \beta_{\pm} &= \sqrt{\frac{1 + \delta_{\pm}^G}{2}}, \quad \sin \beta_{\pm} = \frac{V}{|V|} \sqrt{\frac{1 - \delta_{\pm}^G}{2}}, \\ \delta_{\pm}^G &= \frac{\Delta_{\pm}^G}{\sqrt{(\Delta_{\pm}^G)^2 + V^2}}, \quad \Delta_{\pm}^G = \frac{3\bar{H}_G \pm (6D_2 + 39D_4)}{2}, \\ \bar{H}_G &= -H - I_0\sigma_G + J_0\sigma_F. \end{aligned} \quad (17)$$

Одноузельные энергии для G -подрешетки определяются выражениями:

$$\begin{aligned} E_{1,4}^G &= (\varepsilon_4^G + \varepsilon_1^G)/2 \mp \sqrt{(\Delta_+^G)^2 + V^2}, \quad E_2^G = \varepsilon_2^G, \\ E_{3,6}^G &= (\varepsilon_6^G + \varepsilon_3^G)/2 \mp \sqrt{(\Delta_-^G)^2 + V^2}, \quad E_5^G = \varepsilon_5^G, \\ \varepsilon_m^G &= \bar{H}_G(m - 7/2) - D_2(m - 7/2)^2 - D_4(m - 7/2)^4. \end{aligned} \quad (18)$$

5. Дисперсионное уравнение. Увеличение поля H , приложенного вдоль легкой оси анизотропии, индуцирует фазовый переход (ФП) первого рода [26, 27] из фазы I в фазу II. Критическое значение H_{sf} , при котором имеет место ФП, находится из условия потери положительной определенности спектра возбуждений Ω_k в фазе I.

Следует отметить, что H_{sf} , вычисленное при феноменологическом подходе, может не совпадать с тем значением, которое находится на основе квантовой теории. Это происходит, в частности, из-за квантовых флуктуаций, которые проявляются при низких температурах и особенно в магнетиках пониженной размерности [28], а также в соединениях с треугольной решеткой. В этом случае из-за фрустраций возрастает влияние квантовых поправок [29, 30], способных приводить к дополнительным особенностям поведения намагниченности.

Учитывая сказанное, при вычислении Ω_k в условиях сильной ОА применим мацубаровские функции Грина (МФГ), построенные в базисе ОХ [23, 24]:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{AB}(l - l', \tau - \tau') &= -\langle \hat{T}_{\tau} \tilde{X}_l^{\alpha}(\tau) \tilde{X}_{l'}^{-\beta}(\tau') \rangle = \\ &= \frac{T}{N} \sum_{k\omega_m} \exp[ik(l - l') - i\omega_m(\tau - \tau')] D_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m). \end{aligned} \quad (19)$$

Угловые скобки обозначают статистическое усреднение от упорядоченного по мацубаровскому времени (влияние оператора $\hat{T}_{\tau}$) произведения ОХ, взятых в гейзенберговском представлении в мацубаровские времена τ и τ' . Узлы l и l' относятся соответственно к подрешеткам A и B , $D_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m)$ – фурье-образ МФГ, k – квазиимпульс, $\omega_m = 2m\pi T$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) – мацубаровская частота [25].

Методика ДТХ изложена во многих работах [23, 24, 31, 32], поэтому на рис. 1 приведем лишь графический вид системы уравнений для $G_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m)$ в приближении невзаимодействующих квазичастиц:

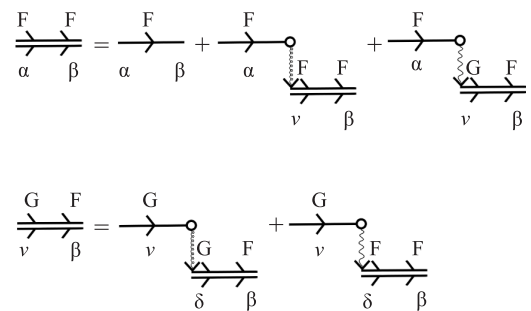


Рис. 1. Система уравнений для $G_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m)$

Двумя линиями со стрелками обозначены искомые функции $G_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m)$, которые связаны с

$D_{\alpha\beta}^{AB}(k, \omega_m)$ равенством $D_{\alpha\beta}^{AB} = G_{\alpha\beta}^{AB}b(\beta)$, в котором $b(\beta)$ – концевой множитель [23, 24], изображаемый кружком. Линии со стрелкой соответствует односторонний пропагатор для A -подрешетки

$$G_{\alpha}^A(i\omega_m) = (i\omega_m + E_p^A - E_q^A)^{-1}, \quad \alpha \equiv \alpha(p, q). \quad (20)$$

Пунктирными и волнистыми линиями обозначены соответственно обменные интегралы I_k и J_k .

После сопоставления графикам аналитических выражений получаем ($p \equiv (k, i\omega_m)$),

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{FF}(p) &= \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^F(i\omega_m) - \\ G_{\alpha}^F(i\omega_m)b(\alpha)(\gamma_{\alpha}^F)^* [I_k X_{\beta}(p) - J_k Y_{\beta}(p)]/2, \quad (21) \\ G_{\nu\beta}^{GF}(p) &= G_{\nu}^G(i\omega_m)b(\nu)(\gamma_{\nu}^G)^* [J_k X_{\beta}(p) - I_k Y_{\beta}(p)]/2, \end{aligned}$$

где

$$X_{\beta}(p) = \sum_{\nu} \gamma_{\nu}^F G_{\nu\beta}^{FF}(p), \quad Y_{\beta}(p) = \sum_{\nu} \gamma_{\nu}^G G_{\nu\beta}^{GF}(p).$$

Решая (21), получаем ($D_{\alpha}^F(i\omega_m) = G_{\alpha}^F(i\omega_m)b^F(\alpha)$)

$$D_{\alpha\alpha}^{FF}(p) = D_{\alpha}^F(i\omega_m) [1 + R_{\alpha}^F(p)]. \quad (22)$$

В этом выражении

$$R_{\alpha}^F(p) = \frac{|\gamma_{\alpha}^F|^2 D_{\alpha}^F \{J_k^2 \Phi^G/4 - I_k [1 + I_k \Phi^G/2]/2\}}{\det(p)}, \quad (23)$$

квазиимпульсная зависимость фурье-образов обменных интегралов имеет вид

$$I_k = 2I[\cos(k_1) + \cos(k_2) + \cos(k_1 + k_2)], \quad (24)$$

$$\begin{aligned} J_k &= 2J[\cos(k_3/2) + \cos(k_3/2 + k_1) + \\ &\quad \cos(k_3/2 + k_1 + k_2)]. \end{aligned} \quad (25)$$

В этих выражениях k_1 , k_2 и k_3 обозначают компоненты квазиимпульса, принадлежащего первой зоне Бриллюэна. Базисные вектора треугольной решетки в плоскостях ионов Mn обозначены как a_1 и a_2 , базисный вектор элементарной ячейки a_3 ориентирован между слоями.

Функции Φ^F и Φ^G определяются формулами

$$\Phi^F(i\omega_m) = \sum_{nl} \frac{|\gamma^F(nl)|^2 (N_n^F - N_l^F)}{i\omega_m + E_n^F - E_l^F}, \quad (26)$$

$$\Phi^G(i\omega_m) = \sum_{nl} \frac{|\gamma^G(nl)|^2 (N_n^G - N_l^G)}{i\omega_m + E_n^G - E_l^G}, \quad (27)$$

в которых N_n^F и N_n^G обозначают числа заполнения ОС для F и G подрешеток. Знаменатель (23)

$$\det(p) = [1 + I_k \Phi^F/2] [1 + I_k \Phi^G/2] - J_k^2 \Phi^F \Phi^G/4. \quad (28)$$

после аналитического продолжения дает уравнение для вычисления спектра возбуждений

$$\det(k, i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta) = 0, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (29)$$

6. Квантовые эффекты и намагниченность АФМ в фазах I и III при $T \ll T_N$. Известно, что в одноосных АФМ при низких температурах в фазе I в магнитном поле, направленном вдоль оси анизотропии, намагниченность с точностью до экспоненциально малых слагаемых равна нулю и не зависит от H . С этой же точностью независимость намагниченности от H имеет место и в фазе III при $H > H_{\text{sat}}^c$ (H_{sat}^c – критическое поле насыщения), когда подрешетки выстраиваются вдоль легкой оси.

Учет ТКOA качественно меняет ситуацию. В этом случае изменение M описывается слагаемыми, имеющими степенную малость, а не экспоненциальную. Действительно при $T \ll T_N$ из выражений (13) и (16) следует, что система уравнений самосогласования для нахождения σ_F и σ_G записывается в виде

$$\sigma_F = S - 3 \sin^2 \alpha_+, \quad \sigma_G = -S + 3 \sin^2 \beta_+. \quad (30)$$

Ее решение для фазы I в квадратичном по параметру B и линейном по H приближениях при учете соотношений (14) и (17) дает выражение для намагниченности $M(H, T) = \sigma_F + \sigma_G$ (в единицах μ_B), в расчете на один ион Mn:

$$M(H) = \left(\frac{192}{25}\right) \left(\frac{B}{I_+}\right)^2 \left(\frac{H}{I_+}\right), \quad I_+ = I_0 + J_0. \quad (31)$$

Видно, что ТКOA из-за квантовых эффектов приводит к увеличению намагниченности с ростом H .

В фазе III $\sigma_F = \sigma_G$ и намагниченность имеет вид:

$$M(H) = 2 \left[\frac{5}{2} - \frac{24}{5} \left(\frac{B}{I_+}\right)^2 + \frac{96}{25} \left(\frac{B}{I_+}\right)^2 \left(\frac{\delta H}{I_+}\right) \right], \quad (32)$$

где $\delta H = H - 2SJ_0$. Второе слагаемое в правой части дает уменьшение намагниченности из-за квантовых эффектов. Третье слагаемое описывает парапроцесс, обусловленный подавлением магнитным полем отмеченных эффектов. Физическая причина квантовых ренормировок связана с тем, что оператор $\hat{\Omega}_4^3$ смешивает состояния с разными проекциями спина.

В связи с этими результатами необходимо сделать важное замечание. Напомним, что неелевское состояние соответствует собственной функции гамильтониана (1) лишь приближенно даже в отсутствие ТКOA. Поэтому в системе присутствуют так называемые нулевые квантовые колебания (НKK), уменьшающие намагниченности подрешеток при $T = 0$.

В одноосном АФМ приложенное вдоль легкой оси магнитное поле в фазе I действует на спины F - и G -подрешеток по разному. Для спинов F -подрешетки поле H способствует упорядочению, тогда как для G -подрешетки оно действует противоположно. Поэтому можно было бы ожидать, что НКК при $H \neq 0$ также могут инициировать дополнительный вклад в зависимость намагниченности от H .

Для разрешения этого вопроса, вычислим вклад НКК в намагниченность (для простоты) одноосного АФМ в продольном магнитном поле в фазе I.

Используя функцию Грина (22) и хорошо известную процедуру нахождения средних, после суммирования по мацубаровским частотам [25], получим выражение, описывающее намагниченность F -подрешетки в расчете на один узел

$$\sigma_F = S - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A_k - \omega_k}{\omega_k} - \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{A_k - \omega_k}{\omega_k} f\left(\frac{\Omega_k^-}{T}\right) + \frac{A_k + \omega_k}{\omega_k} f\left(\frac{\Omega_k^+}{T}\right) \right\}, \quad (33)$$

где $f(x)$ – функция распределения Бозе–Эйнштейна,

$$\Omega_k^\pm = \omega_k \pm H, \quad \omega_k = \sqrt{[A_k - SJ_k][A_k + SJ_k]}, \quad A_k = \varepsilon_a + S(J_0 + I_0 - I_k), \quad \varepsilon_a = 4D_2 + 34D_4. \quad (34)$$

Для намагниченности G -подрешетки получаем

$$\sigma_G = -S + \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A_k - \omega_k}{\omega_k} + \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{A_k + \omega_k}{\omega_k} f\left(\frac{\Omega_k^-}{T}\right) + \frac{A_k - \omega_k}{\omega_k} f\left(\frac{\Omega_k^+}{T}\right) \right\}. \quad (35)$$

Суммы в первых строках (33) и (35) обусловлены НКК, а слагаемые вторых строк описывают уменьшение намагниченностей подрешеток за счет тепловых возбуждений квазичастиц.

Существенно, что вклады НКК не зависят от H . В результате намагниченность магнетика в расчете на один ион Mn при $T \ll T_N$ не зависит от НКК и определяется только тепловыми флуктуациями

$$M(H, T) = \frac{1}{N} \sum_k \left\{ f\left(\frac{\Omega_k^-}{T}\right) - f\left(\frac{\Omega_k^+}{T}\right) \right\}. \quad (36)$$

Однако, эта формула дает увеличение M с ростом поля H в области $0 < H < H_{sf}$, значительно меньшее, чем это наблюдается в эксперименте [15].

При $B \neq 0$ НКК начинают давать вклад в намагниченность, но при реальных параметрах ОА они много меньше вклада (31). Это связано с тем, что,

кроме малостей по B и H , НКК приводят к дополнительной малости, связанной с разложением по $1/r_0^3$.

Сказанное снимает поставленный вопрос о вкладе НКК в зависимость $M(H)$ в фазе I.

7. Ренормировки критических полей. Граница области реализации фазы I определяется полем спин-флоп перехода H_{sf} , которое находится из условия обращения в ноль энергии возбуждения при $k = 0$. Из формул (26) и (27) при $T \ll T_N$ получаем

$$\Phi^F(i\omega_m) = \frac{2\tilde{S}}{i\omega_m - E_{21}^F}, \quad \Phi^G(i\omega_m) = \frac{-2\tilde{S}}{i\omega_m + E_{21}^G}, \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= S(1 + \xi), \quad \xi = (12/25)(B/I_+)^2, \\ E_{21}^F &= H + \varepsilon_a + SI_+ + 36B^2/(5I_+), \\ E_{21}^G &= -H + \varepsilon_a + SI_+ + 36B^2/(5I_+). \end{aligned} \quad (38)$$

Возникновение ренормировки $\sim \xi$, обусловлено учетом взаимодействия спиновой динамики с динамикой высших мультиполей. Зацепление этих степеней свободы происходит из-за ТКОА. При этом дисперсионное уравнение принимает вид:

$$[\omega - E_{21}^F + \tilde{S}I_k][\omega + E_{21}^G - \tilde{S}I_k] + (\tilde{S}J_k)^2 = 0. \quad (39)$$

Из него получаем две ветви спектра в фазе I:

$$\Omega_{1k} = \tilde{\omega}_k - H, \quad \Omega_{2k} = \tilde{\omega}_k + H, \quad (40)$$

$$\tilde{\omega}_k = \sqrt{[\tilde{\varepsilon}_a + E_k^-][\tilde{\varepsilon}_a + E_k^+]}, \quad (41)$$

$$E_k^\mp = \tilde{S}(I_0 - I_k + J_0 \mp J_k), \quad \tilde{\varepsilon}_a = \varepsilon_a + 6B^2/I_+. \quad (42)$$

Отсюда следует выражение для критического поля

$$H_{sf} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_a(\tilde{\varepsilon}_a + 2\tilde{S}J_0)}. \quad (43)$$

В фазе III подрешетки идентичны, поэтому

$$\Phi^F(i\omega_m) = \Phi^G(i\omega_m) = 2\tilde{S}/(i\omega_m - E_{21}), \quad (44)$$

и две ветви спектра определяются выражениями:

$$\Omega_k^\pm = H - H_{\text{sat}}^c + \tilde{S}[I_0 - I_k + J_0 \pm J_k], \quad (45)$$

где второе критическое поле имеет вид

$$H_{\text{sat}}^c = 2\sigma J_0 - \tilde{\varepsilon}_a, \quad \sigma = S - (24/5)(B/I_+)^2. \quad (46)$$

Видно, что ренормировки сужают область реализации фазы II.

8. Особенности $M(H)$ при спин-флоп переходе. При решении уравнений для σ_F и σ_G параметры модели выбирались при учете четырех условий.

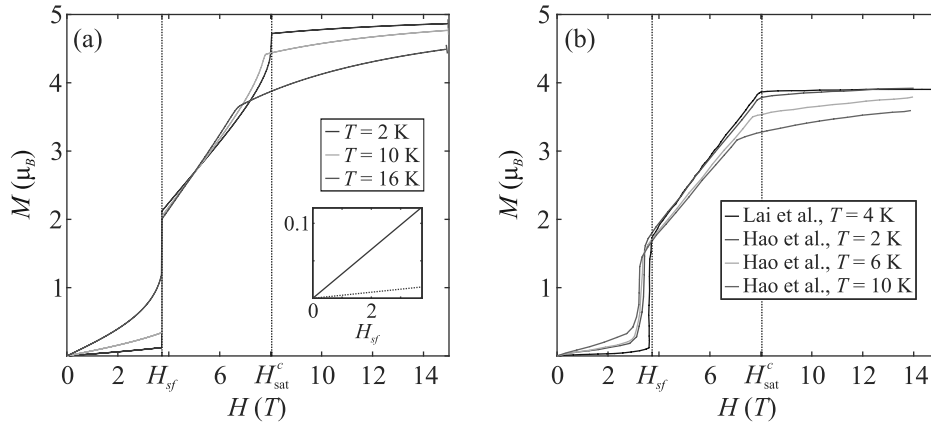


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Теоретические зависимости z -компоненты суммарной намагниченности подрешеток M^z от поля H , приложенного вдоль оси Oz при температурах: $T = 2, 10, 16$ К. Параметры $I_0 = 0.516$ мэВ, $J_0 = 0.219$ мэВ, $D_2 = 0.0095$ мэВ, $D_4 = 0$, $B = 0.12$ мэВ (см. текст). На вставке сплошной линией приведена зависимость $M^z(H)$ для $H \leq H_{sf}$, рассчитанная из формулы (31). Штриховой линией продемонстрирована зависимость в отсутствие тригональной компоненты кристаллического поля ($B = 0$), см. (36). (б) – Экспериментальные данные для полевых зависимостей намагниченности в поле $H||c$ для MnBi_2Te_4 из работ [14, 15] при температурах $T = 2, 4, 6, 10$ К

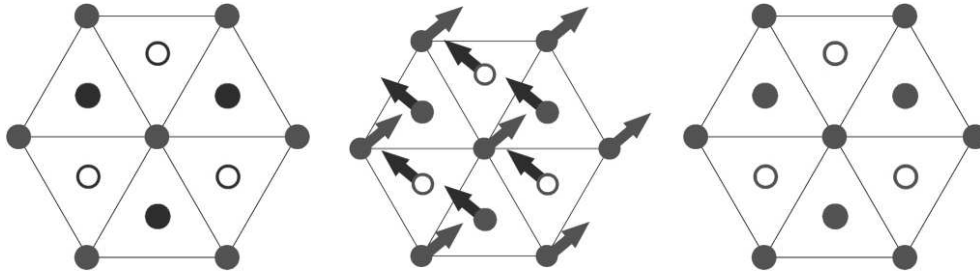


Рис. 3. (Цветной онлайн) Магнитная структура в фазах I, II, III (слева направо). Красный цвет соответствует положительной компоненте намагниченности вдоль оси Oz , синий – отрицательной. Стрелки в фазе II (рисунок посередине) определяют вектор намагниченности в плоскости $\mathbf{M}_\perp = (M^x, M^y)$

Два из них определяются выражениями для критических полей (43) и (46). Получающиеся значения должны были совпадать с экспериментальными данными $H_{sf} = 3.7$ Тл и $H_{sat}^c = 8.1$ Тл [14, 15].

Третье ограничение связывает сумму обменных интегралов I_0 и J_0 со среднеполевым значением температуры Нееля: $T_N = S(S+1)(I_0 + J_0)/3$. Наконец, параметр B определялся так, чтобы обеспечить при $T \ll T_N$ парапроцесс в фазе III и заметное нарастание намагниченности в фазе I, но при этом сохранить фазу II.

Результаты решения уравнений самосогласования (4)–(7), демонстрирующие важную роль квантовых эффектов при интерпретации обнаруженных в MnBi_2Te_4 особенностей поведения намагниченности, показаны на рис. 2а.

В фазах I и III при $T \ll T_N$ имеет место рост M при увеличении H . Это согласуется с экспериментальными данными, показанными на рис. 2б. Физи-

ческая причина такой зависимости, как отмечалось выше, связана с проявлением квантовых эффектов, инициируемых ТКOA. При возрастании температуры к отмеченному эффекту примешиваются вклады от тепловых флуктуаций. Этим объясняется более сильная зависимость $M(H)$ в области больших T .

На рисунке 3 показаны фрагменты положений ионов Mn, формирующих три ближайших слоя. В каждом из них ионы находятся в узлах треугольных решеток. Левая часть рис. 3 соответствует фазе I, в которой спины F-подрешетки находятся в среднем слое (красные сплошные кружки) и ориентированы вдоль оси Oz . Проекция положений ионов Mn из нижнего и верхнего слоев на средний слой показаны синими кружками и окружностями соответственно. Спины этих ионов ориентированы против оси Oz (G-подрешетка). Средний фрагмент показывает спиновую конфигурацию в фазе II. В ней z -проекции спинов обеих подрешеток ориентированы по оси Oz ,

а поперечные составляющие для F- и G-подрешеток обозначены красными и синими стрелками соответственно. В фазе III (правый фрагмент) все спины ориентированы по оси Oz .

Из сравнения зависимостей $M(H)$, показанных на рис. 2а и б видно, что в фазе III теоретическое значение намагниченности оказывается близким к номинальному, но больше экспериментального. Такое расхождение объяснялось ранее влиянием дефектов [15], которые не учитываются в рассматриваемой модели. В этой связи отметим работу [19], в которой для гетероструктуры, приготовленной на основе $MnBi_2Se_4$ и Bi_2Te_3 и являющейся АФМ ТИ, получены важные результаты о характере разупорядочения и о влиянии неидеальности на магнитные свойства. В частности, было установлено, что ионы марганца могут занимать позиции, отличные от номинальных. При этом возникают магнитные взаимодействия между ионами Mn и Se, что указывает на наведение магнитного момента на ионах Se. Эти данные говорят о необходимости обобщения рассмотренной модели с целью учета дефектов, в окрестности которых будет происходить перераспределение спиновой плотности. В результате можно ожидать уменьшение M . Однако рассмотрение этого важного вопроса выходит за рамки данной работы.

Новая особенность, обусловленная ТКОА, проявляется в фазе II (см. рис. 4): кроме σ_F^x и $\sigma_G^x = -\sigma_F^x$ отличны от нуля σ_F^y и $\sigma_G^y = \sigma_F^y$, (ось Ox параллельна базисному вектору a_1 треугольной решетки). С феноменологической точки зрения возникающая геометрия векторов намагниченностей подрешеток объясняется двусностью кристалла, при которой появляется “эффективное” поле анизотропии, направление которого не совпадает с направлением вектора a_1 .

Зависимости не равных нулю компонент намагниченностей подрешеток от H , когда реализуется прохождение через три фазы, показано на рис. 4.

9. Заключение.

1. Показано, что квантовые эффекты, инициируемые тригональной компонентой ОА, приводят в низкотемпературной области к возникновению зависимости намагниченности от магнитного поля как до спин-флип перехода, так и в фазе “схлопнутых” подрешеток. При этом наличие парапроцесса в фазе III, когда намагниченности подрешеток ориентированы вдоль оси Oz , связано с тем, что магнитное поле подавляет квантовые эффекты и приводит к экспериментально наблюдаемому росту намагниченности. Это соответствует особенностям в зависимости $M(H)$, обнаруженным при изучении магнитных свойств АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$.

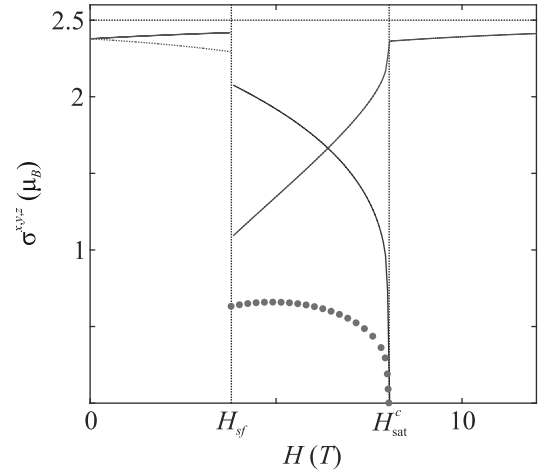


Рис. 4. (Цветной онлайн) В фазе I красная сплошная (штриховая) линия соответствует значениям σ_F^z ($|\sigma_G^z|$); в фазе II красная, синяя (сплошная) и зеленая (пунктирная) линии демонстрируют зависимости $\sigma_F^z = \sigma_G^z$, $\sigma_F^x = -\sigma_G^x$ и $|\sigma_F^y|$ ($\sigma_F^y = \sigma_G^y$) соответственно; в фазе III $\sigma_F^z = \sigma_G^z$, (красная линия). $T = 2$ K, параметры как и на рис. 2а

2. Утверждение о важной роли квантовых эффектов основано на результатах теории, использующей атомное представление, а также диаграммную технику для ОХ. Такой подход позволил корректно описать влияние сильной ОА и получить дисперсионное уравнение, определяющее спектр возбуждений при учете недиагонального характера ОА;

3. Проанализированы поправки к намагниченности подрешеток, обусловленные нулевыми квантовыми колебаниями, возникающими вследствие того, что нееевское состояние не соответствует точной функции гамильтониана системы. В аналитическом виде показано, что поправки не зависят от магнитного поля и не могут объяснить обнаруженные в эксперименте аномалии.

4. После решения дисперсионного уравнения из условий потери положительной определенности спектра возбуждений в магнитном поле получены ренормированные выражения для критических полей H_{sf} и H_{sat}^c .

5. При учете этих соотношений посредством численного решения системы уравнений самосогласования построены зависимости намагниченности от магнитного поля при различных температурах. Полученные закономерности качественно правильно отражают особенности полевых зависимостей в $MnBi_2Te_4$.

6. Применение результатов теории не ограничивается описанием магнитной подсистемы $MnBi_2Te_4$, а в равной мере может быть использовано для ин-

терпретации свойств анизотропных квазидвумерных магнетиков с треугольной решеткой в слоях. Вместе с тем необходимо отметить, что перенос результатов теории на ультратонкие пленки, актуальные с точки зрения возможной реализации в них квантового аномального эффекта Холла, требует корректировки. Это связано, в частности, с тем, что в нашем рассмотрении оператор ОА однороден, тогда как в тонких пленках поверхностные эффекты могут индуцировать неоднородность кристаллического поля.

Финансирование работы. Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда # 23-22-10021, <https://rscf.ru/project/23-22-10021/> и Красноярского краевого фонда науки.

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

1. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
2. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
3. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
4. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al. (Collaboration), *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
5. S. Li, T. Liu, C. Liu, Y. Wang, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, *National Science Review* **11**, nwac296 (2023).
6. J.-Q. Yan, Q. Zhang, T. Heitmann, Z. Huang, K. Y. Chen, J.-G. Cheng, W. Wu, D. Vaknin, B. C. Sales, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Mater.* **3**, 064202 (2019).
7. B. Li, J.-Q. Yan, D. M. Pajerowski, E. Gordon, A.-M. Nedi, Y. Sizyuk, L. Ke, P. P. Orth, D. Vaknin, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 167204 (2020).
8. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова, С. О. Фильнов, И. И. Климовских, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 241 (2022).
9. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
10. D. A. Glazkova, D. A. Estyunin, A. S. Tarasov, N. N. Kosyrev, V. A. Komarov, G. S. Patrin, V. A. Golyashov, O. E. Tereshchenko, K. A. Kokh, A. V. Koroleva, and A. M. Shikin, *Crystallogr. Rep.* **69**, 79 (2024).
11. Y. Li, Z. Jiang, J. Li, S. Xu, and W. Duan, *Phys. Rev. B* **100**, 134438 (2019).
12. J. Li, J. Y. Ni, X. Y. Li, H.-J. Koo, M.-H. Whangbo, J. S. Feng, and H. J. Xiang, *Phys. Rev. B* **101**, 201408 (2020).
13. В. В. Вальков, А. О. Злотников, А. Гамов, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 330 (2023).
14. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
15. Y. Lai, L. Ke, J. Yan, R. D. McDonald, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. B* **103**, 184429 (2021).
16. Y. Liu, L.-L. Wang, Q. Zheng, Z. Huang, X. Wang, M. Chi, Y. Wu, B. C. Chakoumakos, M. A. McGuire, B. C. Sales, W. Wu, and J. Yan, *Phys. Rev. X* **11**, 021033 (2021).
17. M. Sahoo, I. J. Onuorah, L. C. Folkers et al. (Collaboration), *Advanced Science*, DOI 10.1002/advs.202402753 (2024).
18. S. X. M. Riberolles, Q. Zhang, E. Gordon, N. P. Butch, L. Ke, J.-Q. Yan, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. B* **104**, 064401 (2021).
19. R. Fukushima, V. N. Antonov, M. M. Otrokov et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Mater.* **8**, 084202 (2024).
20. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов переходных групп*, Наука, М. (1972).
21. А. К. Звездин, В. М. Матвеев, А. А. Мухин, А. И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах*, Наука, М. (1985).
22. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **285**, 542 (1965).
23. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
24. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
25. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматлит, М. (1962).
26. А. С. Боровик-Романов, *Антиферромагнетизм*, в кн. *Антиферромагнетизм и ферриты*, Изд-во АН СССР, М. (1962), с. 5.
27. А. Г. Гуревич, *Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках*, Наука, М. (1973).
28. А. И. Смирнов, *УФН* **186**, 633 (2016).
29. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова, О. А. Петренко, А. Я. Шапиро, Л. Н. Демьянец, *Письма в ЖЭТФ* **80**, 231 (2004).
30. Л. Е. Свистов, Л. А. Прозорова, А. М. Фарутин, А. А. Гиппиус, К. С. Охотников, А. А. Буш, К. Е. Каменцев, Э. А. Тищенко, *ЖЭТФ* **135**, 1151 (2009).
31. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Физматлит, М. (1994).
32. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).

Структурное разнообразие и фазовые переходы в боратах со смешанной валентностью $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($0.0 < x \leq 0.4$)¹⁾

Н. А. Бельская^{†*2)}, Н. В. Казак*, А. Д. Васильев*, Е. В. Еремин*, Е. М. Мошкина*, Д. А. Великанов*,
Л. Н. Безматерных*, С. Ю. Гаврилкин[×], С. Г. Овчиников*

[†] Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

* Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

[×] Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 августа 2024 г.

После переработки 3 сентября 2024 г.

Принята к публикации 4 сентября 2024 г.

Моно- и поликристаллические образцы оксидоборатов $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0.0, 0.2, 0.4$) получены впервые методами спонтанной кристаллизации из раствора–расплава и твердофазной реакцией. Исследования рентгеновской дифракции показали, что с ростом концентрации марганца соединения кристаллизуются в ряду людвигит (пр.гр. *Pbam*) – халсит (пр.гр. *P2/m*) – ортопинакиолит (пр.гр. *Pbam*) и относятся к семейству боратов “обойного типа 3 Å”. Общей особенностью материалов является наличие октаэдрических комплексов (стенок), построенных из четных кристаллографических позиций, заполненных ионами марганца со смешанной валентностью. Исследования статической намагниченности и теплоемкости соединений состава $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0.0, 0.2, 0.4$), выполненные впервые, показали, что при охлаждении возникают магнитные переходы, связанные с упорядочением нескольких магнитных подсистем.

DOI: 10.31857/S0370274X24100089, EDN: GUAOEQ

Введение. Явление зарядового упорядочения является одним из наиболее интригующих в физике конденсированного состояния, затрагивающее основные подсистемы вещества: структурную, электронную, орбитальную и магнитную [1–3]. Начиная с открытия фазового перехода в магнетите (Fe_3O_4) [4], зарядовое упорядочение является объектом интенсивных исследований в оксидных (манганиты [5], ванадаты [6] и т.д.), а с недавнего времени и в боратных соединениях.

Людвигит железа Fe_3BO_5 при охлаждении испытывает каскад фазовых переходов, первый из которых ($T_{\text{st}} = 283\text{ K}$) связан с упорядочением зарядовой подсистемы и сопровождается структурным переходом и аномалиями электросопротивления. Далее происходит последовательное и независимое упорядочение двух магнитных подсистем ($T_N = 110$ и 70 K), построенных на неэквивалентных кристаллографических позициях. В результате возникает неколлинеарное ортогональное упорядочение спинов. Рентгеновскими, синхротронными, спектроскопическими и нейтронными методами экспери-

ментально установлено, что эффекты зарядового и структурного упорядочения затрагивают только четные позиции M2 и M4. В триаде M4–M2–M4 [7] имеется один экстра-электрон, который может быть “локализован” на узле M2, создавая связанные зарядовые состояния $\text{Fe}^{3+}\text{--Fe}^{2+}\text{--Fe}^{3+}$ или быть “распределен” между тремя узлами ($\text{Fe}^{2.67+}\text{--Fe}^{2.67+}\text{--Fe}^{2.67+}$) (тример) или между двумя узлами ($\text{Fe}^{2.5+}\text{--Fe}^{2.5+}\text{--Fe}^{3+}$) (димер). Зарядовое упорядочение в Fe_3BO_5 происходит по типу димеризации спиновой лестницы M4–M2–M4, при котором ион Fe2 смещается в направлении иона Fe4 в триаде, создавая димеры, распространяющиеся вдоль короткого кристаллографического направления. Электронный переход сопровождается изоструктурным переходом *Pbam*(55) $\rightarrow$ *Pbam*(62) с удвоением параметра *c*. Низкотемпературные исследования показали, что полного порядка заряда не возникает вплоть до 2 K [1, 7–10].

Подобное поведение зарядовой и связанной с ней фононной подсистем можно ожидать и в других изоструктурных соединениях при замене иона железа ионами кобальта, марганца или ванадия, проявляющими гетеровалентность. В связи с этим особую актуальность приобретает поиск людвигитов со смешанной валентностью и исследование в них возмож-

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

²⁾ e-mail: nbelsk@mail.ioffe.ru

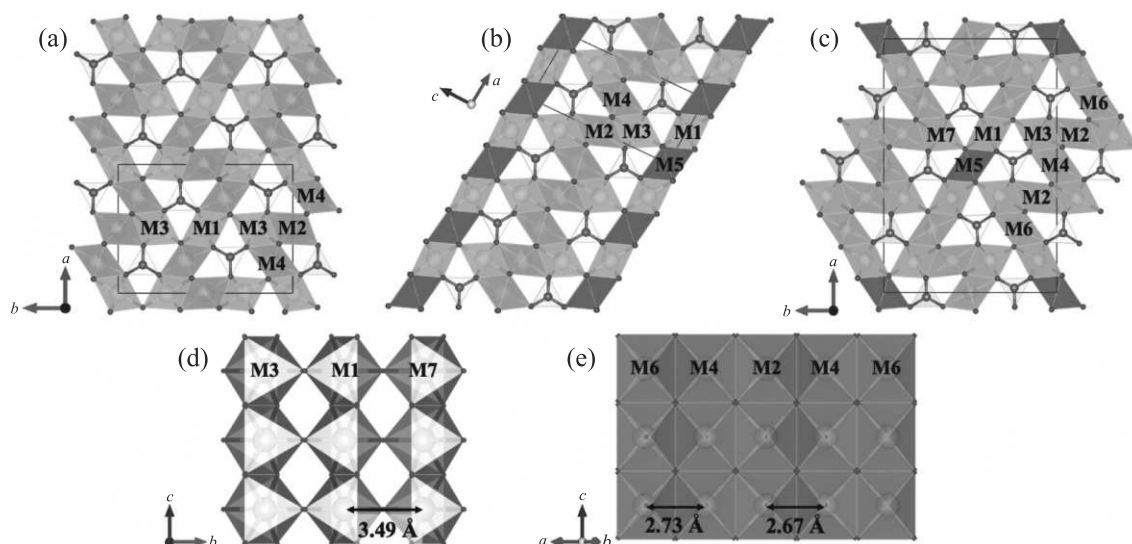


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллические структуры: (a) – Mg_2MnBO_5 со структурой людвигита; (b) – $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ со структурой халсита; (c) – $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ со структурой ортопинакиолита. Октаэдрические комплексы, в которых ионы разделены наибольшим (d) и наименьшим (e) межйонным расстоянием на примере ортопинакиолита. Октаэдрические позиции M5, занятые преимущественно ионами Mn^{3+} , обозначены синим цветом.

ных электронных/структурных переходов. В литературе имеется одна работа, в которой упоминается исследование кристаллической структуры марганцевого людвигита Mn_3BO_5 [11]. Наши прямые попытки синтезировать Mn_3BO_5 методом спонтанной кристаллизации или твердофазным методом пока оказались безуспешными. Поэтому людвигит Mg_2MnBO_5 был выбран в качестве исходного материала с последующим замещением части ионов магния на марганец. Это позволило получить полиморфные фазы людвигита и пронаблюдать появление смешанно-валентных состояний ионов марганца, а также впервые исследовать эволюцию магнитных свойств в полученных соединениях.

Синтез образцов и экспериментальные методики. Монокристаллы оксиборатов $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0.2$ и 0.4) были выращены впервые раствор-расплавным методом, подробно описанном в разделе S1 дополнительных материалов.

Для синтеза Mg_2MnBO_5 был применен метод твердофазной реакции (раздел S2).

В разделе S3 дополнительных материалов приведено описание экспериментальных методик.

Результаты и обсуждение. Рассеяние рентгеновского излучения монокристаллом $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ ($x = 0.2$) показало, что это соединение изоструктурно минералу халсит и кристаллизуется в моноклинной симметрии ($P2/m(10)$) с параметрами эле-

ментарной ячейки (ПЭЯ) $a = 5.3266(4) \text{ \AA}$, $b = 3.0180(2) \text{ \AA}$, $c \sim 10.8743(7) \text{ \AA}$, $\beta = 95.274(2)^\circ$, $V = 174.1(4) \text{ \AA}^3$, $Z = 1$ (табл. S2).

Кристаллы состава $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ ($x = 0.4$) изоструктурны минералу ортопинакиолит, обладают ромбической симметрией ($Pbam(55)$) с ПЭЯ $a = 18.3332(14) \text{ \AA}$, $b = 12.5173(10) \text{ \AA}$, $c = 3.0385(2) \text{ \AA}$, $V = 697.28(9) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$ (табл. S2).

Изменение симметрии в полной мере отразилось на морфологии кристаллов (рис. S2). Кристаллы с более низкой симметрией имели пластинчатую морфологию, близкую к родительской кристаллической фазе пинакиолита [12] (рис. S2a). В свою очередь, габитус кристаллов со структурой ортопинакиолита представлял собой удлинённые призмы в форме игл (рис. S2b). Кристаллы людвигитов, обладающие такой же пространственной группой симметрии, также характеризуются ярко выраженной анизотропией формы и похожи на иглы [13, 14].

Исследование порошкообразных образцов Mg_2MnBO_5 показало, что материал кристаллизуется в ромбической симметрии, пространственная группа $Pbam(55)$, и изоструктурен минералу людвигит ($R_w = 2.13\%$, $S = 1.7025$). ПЭЯ $a = 9.1944(6) \text{ \AA}$, $b = 12.4751(7) \text{ \AA}$, $c = 2.99885(17) \text{ \AA}$, $V = 343.97(4) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, близки к полученным ранее в работе [15].

Общими кристаллографическими особенностями полученных материалов являются катионы (Me) внутри кислородных октаэдров – MeO_6 и атомы бора в планарном окружении кислорода – тре-

Таблица 1. Факторы заполнения неэквивалентных кристаллографических позиций в $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{VO}_5$ ($x = 0$ [15], 0.2 и 0.4). Нумерация атомов присвоена на основе структуры людвигита для унификации представлений кристаллических структур

Mg_2MnVO_5 [15]			$\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{VO}_5$			$\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{VO}_5$		
Позиции	Кристаллические позиции Вайкоффа	Коэффициент заселенностей	Позиции	Кристаллические позиции Вайкоффа	Коэффициент заселенностей	Позиции	Кристаллические позиции Вайкоффа	Коэффициент заселенностей
M1	2b	$0.86\text{Mg} + 0.14\text{Mn}$	M1	2e	$0.71\text{Mg} + 0.29\text{Mn}$	M1	4g	$0.63\text{Mg} + 0.37\text{Mn}$
M2	2c	$0.65\text{Mg} + 0.35\text{Mn}$	M2	2m	$0.6\text{Mg} + 0.4\text{Mn}$	M2	4h	$0.34\text{Mg} + 0.66\text{Mn}$
M3	4h	$0.9\text{Mg} + 0.1\text{Mn}$	M3	2n	$0.8\text{Mg} + 0.2\text{Mn}$	M3	4g	$0.7\text{Mg} + 0.3\text{Mn}$
M4	4g	$0.27\text{Mg} + 0.73\text{Mn}$	M4	2m	$0.58\text{Mg} + 0.42\text{Mn}$	M4	2d	$0.92\text{Mg} + 0.08\text{Mn}$
			M5	1a	$0.09\text{Mg} + 0.91\text{Mn}$	M5	2b	Mn
						M6	4h	$0.31\text{Mg} + 0.69\text{Mn}$
						M7	4g	$0.79\text{Mg} + 0.21\text{Mn}$

угольные $(\text{VO}_3)^{3-}$ -группы. Кислородные октаэдры, объединяясь через общие ребра, образуют стенки различной формы. Соединяясь вершинными атомами кислорода и посредством VO_3 -групп, стенки формируют сложные каркасы кристаллических структур, как показано на рис. 1a–с. Среди ПЭЯ выделяется параметр $\sim 3 \text{ \AA}$, на основании чего, исследуемые соединения можно отнести к семейству боратов “обойного типа $3 \text{ \AA}$ ” (“wall-paper type”), в которых основные структурные мотивы, распространяются вдоль короткого кристаллографического направления (рис. 1d и e). Катионы занимают несколько неэквивалентных кристаллографических позиций (табл. 1). Часть позиций заняты смесью ионов магния и марганца. Упорядоченное распределение катионов вызывает увеличение числа неэквивалентных позиций и, соответственно, кратное увеличение параметров решетки. Эффект структурного упорядочения наблюдается на примере ортопинакиолита, который, обладая одной той же группой симметрии, что и людвигит (*Pbam*(55)), имеет семь неэквивалентных позиций вместо четырех.

Чтобы унифицировать описание сложных кристаллических структур полученного ряда соединений, можно выделить основные структурные элементы и общие структурные комплексы. Во всех исследуемых структурах имеются нечетные катионные позиции (M1, M3, M5, M7), занятые преимущественно ионами одного сорта (табл. 1). Концентрация ионов Mg^{2+} в позициях M1, M3 и M7 достигает 90, 80, 70 % для $x = 0.0$, 0.2 и 0.4 соответственно. Соединяясь через вершинный атом кислорода с углом связи $\text{Me}-\text{O}-\text{Me} \approx 120^\circ$, октаэдры M1O_6 , M3O_6 и M7O_6 формируют триады M3–M1–M3 (людвигит, халсит) и M7–M1–M3 (ортопинакиолит) с наибольшим межкатионным расстоянием (табл. 2 и рис. 1d). Позиция M5 занята исключительно ионами Mn^{3+} (табл. S3) [16]. Таким

образом, металлические ионы в нечетных позициях формируют катионно-упорядоченный комплекс.

Напротив, четные металлические позиции (M2, M4, M6) характеризуются высокой степенью катионного беспорядка и заняты смесью ионов магния и марганца. Ряды из N октаэдров, где $N = 3, 5, 7, \dots, \infty$, соединенных общим ребром, объединяются в стенки. В людвигите Mg_2MnVO_5 стенка состоит из триад M4–M2–M4 ($N = 3$), в халсите – это пентада M6–M2–M4–M2–M6 ($N = 5$). В такеучиите $\text{Mg}_{1.71}\text{Mn}_{1.29}\text{VO}_5$ [17] данный структурный комплекс представлен стенкой из семи октаэдров ($N = 7$) и формирует гептаду (M8–M6–M4–M2–M4–M6–M8) и, наконец, в халсите последовательно соединенные октаэдры из позиций M2 и M4 формируют бесконечную стенку ($N = \infty$). Внутри стенки катионы разделены наименьшими межкатионными расстояниями (табл. 2).

Согласно расчетам, валентное состояние ионов марганца в четных кристаллографических позициях нецелочисленное (дробное) (табл. S3) [16]. Концентрация таких состояний прогрессивно растет с ростом содержания марганца (верхняя вставка к рис. S3). Опираясь на результаты анализа, можно ожидать появления смешанно-валентных состояний в людвигите Mn_3VO_5 при условии полного замещения ионов Mg^{2+} ионами Mn^{2+} .

В варвиките Mn_2VO_4 зарядовое упорядочение происходит по орбитальному механизму и связано с пиннингом электронной подсистемы на кристаллической решетке [18–20]. Поскольку Mn^{3+} является янтеллеровским ионом, вырождение e_g -орбиталей снижается, вызывая искажение координационного октаэдра Mn^{3+}O_6 на узле M1. Полагается, что удлинение связи M1–O напрямую связано с d_{z^2} орбиталью, ориентированной вдоль нее. Минимизация энергии деформации вызывает орбитальное упорядочение путем выстраивания длинных осей октаэдров

Таблица 2. Межионные расстояния в катионно-упорядоченных (нечетные позиции) и неупорядоченных (четные позиции) структурных комплексах в $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0$ [15], 0.2 и 0.4)

Соединение	В нечетных позициях		В четных позициях
	$d_{M3-M1-M3}, \text{\AA}$	$d_{M5-M1-M5}, \text{\AA}$	$d_{(M6-)M4-M2-M4(-M6)}, \text{\AA}$
Mg_2MnBO_5	3.4993(14) $N = 3$ (триада)		2.7863(11)–2.7863(11) $N = 3$ (триада)
$\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$	3.4810(12) $N = 3$ (триада)	3.0611(2)	2.655(45)–2.675(45) $N = \infty$ (бесконечная стенка)
$\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$	3.4952(22) $N = 3$ (триада)	3.0811(13)	2.7321(32)–2.66664(30) $N = 5$ (пентада)

ров M1O_6 в двойные цепочки, и сопровождая зарядовое упорядочение. Такое упорядочение деформаций вызывает понижение симметрии до моноклинной (пр. гр. $P2_1/n$ (14)). Двойные цепочки формируют периодическое пространственное распределение заряда, что отвечает минимуму потенциальной энергии системы, связанной с электрон-фононным и электрон-электронным взаимодействиями. Поскольку перекрытие с p -орбиталями кислорода гораздо больше в случае d_{z^2} -орбиталей, чем t_{2g} -орбиталей, такое упорядочение заряда сохраняется при температурах намного выше упорядочения магнитных моментов ($T_N = 26$ K) и наблюдается вплоть до 1000 K [18]. В t_{2g} -системах, прототипом которых являются людовигит Fe_3VO_5 и варвикит Fe_2VO_4 , янтеллеровское расщепление и расщепление кристаллического поля слабее и установление магнитного и зарядового порядков возникают при температурах одного порядка величины: $T_N = 110$ K, $T_{\text{CO}} = 283$ K в людовигите и 150 и 340 K в варвиките [1, 8–10, 21–23]. Орбитальное упорядочение является не только источником зарядового упорядочения в Mn_2VO_4 , но и катионного упорядочения в замещенном MgMnBO_4 и, как следствие, дальнего магнитного порядка в последнем [24].

Катионно-упорядоченная позиция М5, вероятно, является следствием упорядочения локальных октаэдрических деформаций, вызванных присутствием янтеллеровского иона Mn^{3+} . Заполнение других неэквивалентных позиций данными ионами приводит к изменению локальной симметрии координационных октаэдров. Чем выше концентрация таких ионов на узле, тем больше октаэдрические искажения. Экспериментально это проявляется в значительном аксиальном удлинении октаэдра Mn^{3+}O_6 , увеличении среднего межионного расстояния $\langle \text{Mn}^{3+}\text{--O} \rangle$ и коррелирует с отрицательной величиной главной компоненты тензора градиента электрического поля (ГЭП) V_{zz} [18] (табл. 3, рис. S3). Позиция М5 в хал-

сите и ортопинакиолите является аналогом позиций М1 в варвикитах Mn_2VO_4 [18] и MgMnBO_4 [24]. По аналогии с Mn_2VO_4 , можно ожидать, что в исследуемых материалах зарядовое упорядочение сохранится при температурах выше комнатной. Кислородные октаэдры M1O_6 , M3O_6 и M7O_6 , преимущественно занятые ионами Mg, аксиально сжаты и показывают наибольшую регулярность (положительная величина V_{zz}) (табл. 3).

Кристаллическая структура Mg_2MnBO_5 была решена ранее [15], но его магнитные свойства до сих пор изучены не были. На рисунке 2 показаны тем-

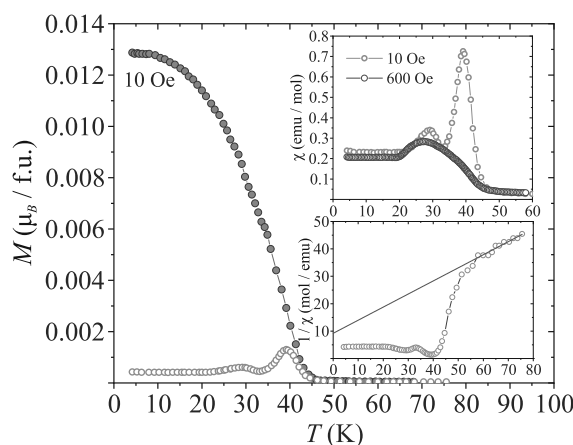


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности поликристалла Mg_2MnBO_5 в поле $H = 10$ Э. Заполненные и пустые символы обозначают режимы измерения при охлаждении в поле (FC) и без него (ZFC). Верхняя вставка: зависимости магнитной восприимчивости от температуры, измеренные в полях 10 и 600 Э. Нижняя вставка: обратная магнитная восприимчивость как функция температуры, прямая линия – аппроксимация законом Кюри–Вейсса

пературные зависимости намагниченности поликристаллического образца Mg_2MnBO_5 , измеренные в поле 10 и 600 Э. Ниже 45 K наблюдается резкий рост

Таблица 3. Главная компонента тензора ГЭП ($e/\text{\AA}^3$) в кристаллах $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0$ [15], 0.2 и 0.4) со структурами людвигит, халсит, ортопинакиолит соответственно и $\text{Mg}_{1-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_4$ ($x = 0.0$ [24], 1.0) со структурой варвикит. Положительный и отрицательный знаки означают аксиальное сжатие и растяжение координационного октаэдра соответственно. Звездочкой (*) помечены значения для кристаллографических позиций, которые заняты ионами Mn^{3+}

	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
Mg_2MnBO_5 [15]	0.0146	-0.1318	0.1642	-0.2205*			
$\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$	0.0719	0.2041	0.0809	-0.1785	-0.221*		
$\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$	0.1085	0.1776	0.0818	-0.1307	-0.174*	-0.1814	0.1202
Mn_2BO_4 [18]	-0.42*	0.11					
MgMnBO_4 [24]	-0.47*	0.12					

магнитного момента и расхождение кривых намагничивания, измеренных при охлаждении в поле (FC) и без поля (ZFC). При уменьшении температуры FC намагниченность монотонно растет, ZFC намагниченность показывает два отчетливых максимума при $T_1 = 40$ и $T_2 = 29$ К в (верхняя вставка к рис. 2). Под действием внешнего магнитного поля 600 Э интенсивность низкотемпературного перехода резко возрастает, а сам переход слегка смещается в область малых температур ($T_2 = 27$ К для $H = 600$ Э), интенсивность перехода при T_1 меняется слабо и его положение не зависит от напряженности внешнего поля (вставка к рис. 2). Таким образом, магнитное поведение Mg_2MnBO_5 обнаруживает общие особенности с другими людвигитами [25, 26]. По аналогии с ними, переход при T_1 можно связать с установлением дальнего ферри- или антиферромагнитного порядка, тогда как аномалия при T_2 , предположительно, связана со спин-ориентационным переходом, в результате которого появляется слабый магнитный момент ($\sim 0.05 \mu_B/\text{ф.ед.}$ при $T = 4.2$ К в поле 600 Э). Обработка обратной магнитной восприимчивости при температурах $T > 60$ К законом Кюри–Вейсса $1/\chi = C/(T - \theta)$, где C – постоянная Кюри, θ – температура Кюри–Вейсса (нижняя вставка к рис. 2) дает параметры магнитной подсистемы, отраженные в табл. 4. Полученная величина магнитного момента $\mu_{\text{eff}} = 3.99 \mu_B/\text{ф.ед.}$ сильно занижена по сравнению с ожидаемой ($4.89 \mu_B/\text{ф.ед.}$), что может быть следствием недостаточно точной обработки данных ввиду ограничения температурного интервала измерений.

Температурные зависимости намагниченности монокристаллов $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ для $x = 0.2$ и 0.4 показаны на рис. 3а и б, соответственно. Следует отметить, что в магнитном поле $H = 500$ Э сигнал от $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ слаб и сильно зашумлен. По этой причине измерения выполнены в поле 5 кЭ. Материал демонстрирует умеренную магнитную анизотропию. Вблизи $T_1 = 90$ К на кривой намагничивания перпендикулярно пластине ($H_{\perp}$),

наблюдается аномалия в виде слабоинтенсивного максимума. Если внешнее поле направлено параллельно плоскости пластинки ($H_{\parallel}$), намагниченность монотонно растет и при $T_2 = 30$ К становится больше таковой в перпендикулярном направлении. Это может быть признаком переориентации магнитной подсистемы, индуцированной как температурой, так и внешним полем. В широком интервале температур ($70 < T < 300$ К), обратная магнитная восприимчивость $1/\chi$ монокристалла $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ подчиняется закону Кюри–Вейсса (вставка к рис. 3а). Результаты подгонки приведены в табл. 4.

В отличие от халсита $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ ортопинакиолит $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ демонстрирует выраженную магнитную анизотропию, свойственную людвигитам [14]. При низких температурах магнитный момент вдоль оси иголки, которая совпадает с кристаллографическим направлением c ($H_{\parallel}$) на порядок величины меньше, чем в плоскости, перпендикулярной оси c ($H_{\perp}$) (рис. 3б). По мере уменьшения температуры соединение испытывает несколько магнитных переходов, связанных с трансформацией магнитной подсистемы. В поле $H = 500$ Э намагниченность показывает слабоинтенсивный максимум при $T_1 \sim 90$ К, за которым следует резкий рост магнитного момента вблизи $T_2 = 33$ К (вставки к рис. 3б). Ниже этой температуры происходит расхождение кривых FC и ZFC. Наконец, при температуре $T_3 = 7.5$ К обе кривые демонстрируют слабое изменение магнитного момента. С ростом напряженности магнитного поля интенсивность перехода при T_2 быстро возрастает и приводит к тому, что в поле $H = 5$ кЭ аномалия при T_1 становится неразличима на фоне растущего ферромагнитного вклада. В парамагнитной области анизотропия магнитной восприимчивости мала. В отличие от халсита, в ортопинакиолите корреляции ближнего порядка сохраняются вплоть до температур 200 К и проявляются в значительном отклонении обратной магнитной восприимчивости $1/\chi$ от закона Кюри–Вейсса. Обработка

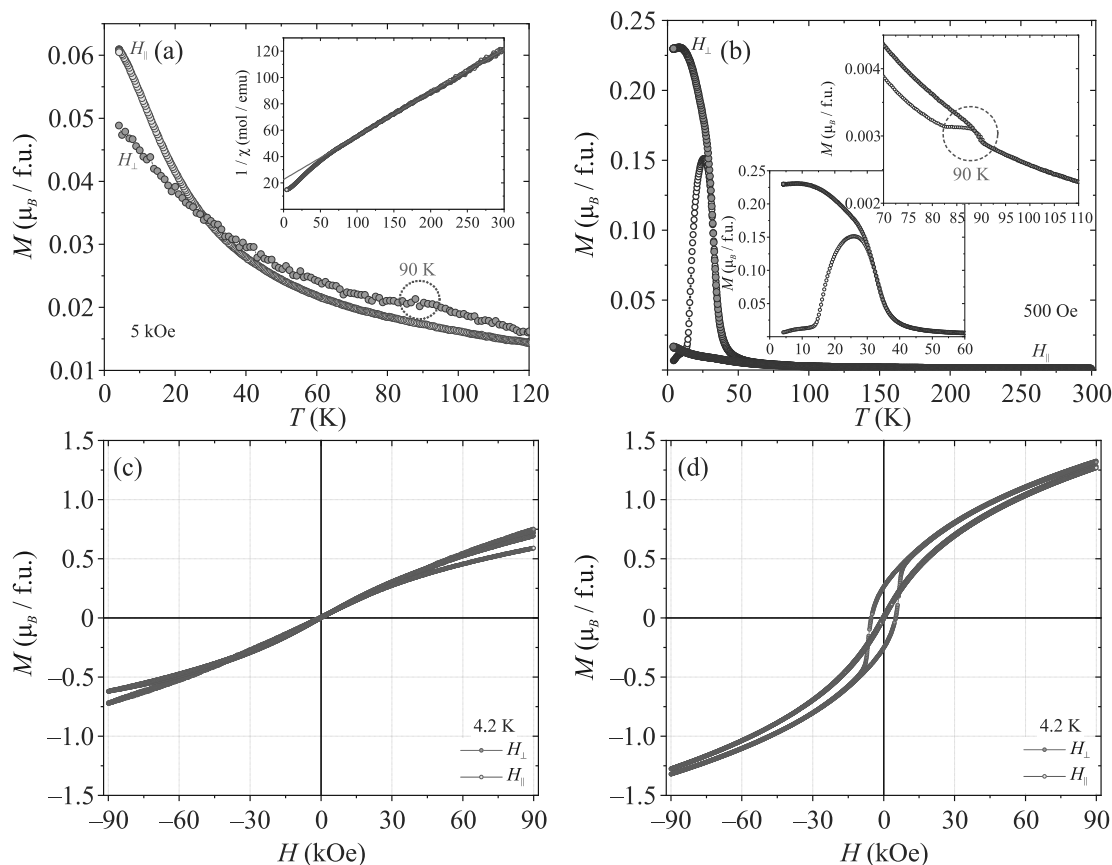


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности монокристаллов $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ (a) и $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ (b) в полях $H = 5$ кЭ и 500 Э соответственно. $H_{\parallel}$ и $H_{\perp}$ соответствуют ориентации внешнего магнитного поля параллельно и перпендикулярно плоскости пластины или иголки соответственно. Заполненные и пустые символы обозначают режимы измерения FC и ZFC. Вставка слева: обратная магнитная восприимчивость $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$, прямая линия – аппроксимация законом Кюри–Вейсса. Вставки справа: области магнитных переходов в увеличенном масштабе. Изотермы намагниченности монокристаллов $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ (c) и $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ (d), измеренные при $T = 4.2$ К в поле, направленном параллельно и перпендикулярно плоскости пластины или иголки соответственно

Таблица 4. Параметры подгонки магнитной восприимчивости монокристаллов $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ и $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ для направлений внешнего поля параллельно и перпендикулярно плоскости пластины и иголки, соответственно. Экспериментальное и теоретическое значение эффективного магнитного момента обозначены как μ_{eff} и μ_{th} , соответственно. Для образца Mg_2MnBO_5 представлены данные усредненные по всем направлениям (поликристалл)

	θ , К		C, Гс · см ³ /моль		$\mu_{\text{eff}}^{\text{ex}}$, $\mu_B/\text{ф.ед.}$		$\mu_{\text{th}}^{\text{th}}$, $\mu_B/\text{ф.ед.}$
	$H_{\parallel}$	$H_{\perp}$	$H_{\parallel}$	$H_{\perp}$	$H_{\parallel}$	$H_{\perp}$	
Mg_2MnBO_5		–19		1.99		3.99	4.89
$\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$	–68	–49	3.04	2.93	4.93	4.84	5.57
$\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$	–51	–53	3.82	3.81	5.53	5.52	6.16

высокотемпературной части магнитной восприимчивости ($200 < T < 300$ К) дает параметры магнитной подсистемы, приведенные в табл. 4.

Все изученные образцы демонстрируют отрицательную температуру θ , что указывает на преобладание антиферромагнитных обменных взаимодействий. Полагая, что ионы Mn^{2+} и Mn^{3+} находятся в высокоспиновом состоянии, $S_{\text{Mn}^{2+}} = 5/2$, $S_{\text{Mn}^{3+}} = 2$,

и $g = 2$ (спиновый магнетизм) с ростом концентрации магнитных ионов ожидается увеличение эффективного момента, приходящегося на формульную единицу $\mu_{\text{eff}}^{\text{th}}$ (табл. 4). Экспериментально полученные значения магнитных моментов слегка занижены по сравнению с ожидаемыми и, действительно, возрастают по мере замещения немагнитного Mg^{2+} магнитным Mn^{2+} .

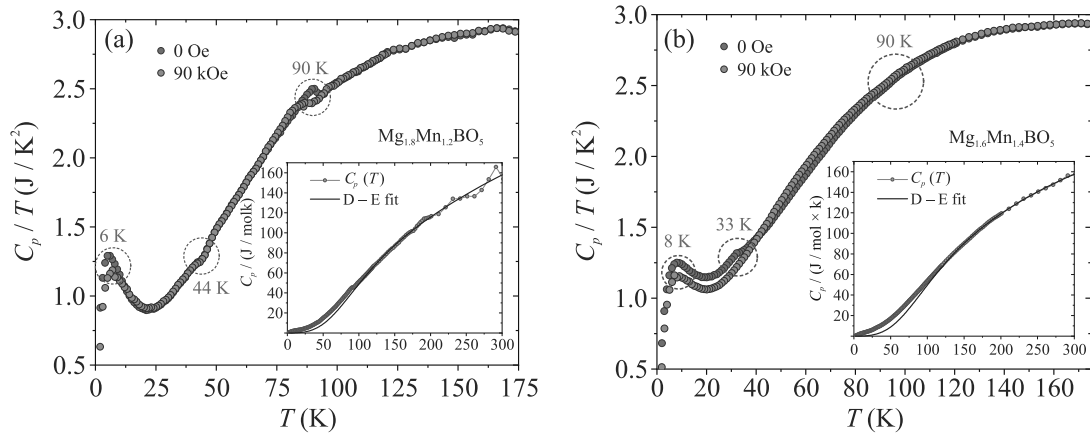


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость C_p/T от температуры для: (а) – $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$; (б) – $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$, полученные в нулевом магнитном поле и поле 90 кЭ. На вставках показана обработка экспериментальных данных по модели Дебая–Эйнштейна

На рисунке 3с и d приведены изотермы намагниченности монокристаллов $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0.2$ и 0.4) измеренные при температуре 4.2 К. Магнитные моменты в поле 90 кЭ далеки от насыщения и равны 0.7 ($x = 0.2$) и 1.3 ($x = 0.4$) $\mu_B/\text{ф.ед.}$, что значительно меньше ожидаемой величины момента насыщения $M_s^{\text{th}} = g(xS_{\text{Mn}^{2+}} + S_{\text{Mn}^{3+}}) = 5$ и 6 $\mu_B/\text{ф.ед.}$, для $x = 0.2$ и 0.4 соответственно. Циклы намагничивания монокристалла $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$ представляют собой разомкнутые петли, что является признаком сильной зависимости от магнитной предыстории (рис. 3с). Магнитная кристаллографическая анизотропия мала. При намагничивании монокристалла $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$ перпендикулярно c -оси, кривая $M(H)$ представляет петлю гистерезиса с величиной коэрцитивного поля $H_c = 5$ кЭ и остаточной намагниченностью 0.23 $\mu_B/\text{ф.ед.}$ (рис. 3d).

В $\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5$ ($x = 0.2$ и 0.4) обнаруживается ряд аномалий на температурных зависимостях теплоемкости (рис. 4): вблизи $T_1 \approx 90$ К, $T_2 = 44$ и 33 К и при $T_3 = 6$ и 8 К для $x = 0.2$ и 0.4 соответственно. В халсите ($x = 0.2$) магнитный переход при T_1 обнаруживается в виде хорошо определенной аномалии λ -типа. В магнитном поле 90 кЭ интенсивность аномалии уменьшается, а сама аномалия смещается в область меньших температур. Заметный излом на кривой $C_p/T(T)$ вблизи T_2 для $x = 0.2$ указывает на возможный магнитный переход, который, тем не менее, явно не проявляется в магнитных измерениях вдоль и перпендикулярно пластине кристалла (рис. 3а). Подобная аномалия теплоемкости при $T_2 = 33$ К наблюдается для $x = 0.4$ и совпадает с началом магнитного перехода в направлении $H_{\perp}$ (рис. 3б). При T_3 в обоих кристаллах имеет место

куполообразная аномалия теплоемкости, интенсивность которой зависит от внешнего магнитного поля.

Решеточный вклад в теплоемкость был обработан с использованием модели Дебая–Эйнштейна (вставка к рис. 4). Термодинамический предел решеточного вклада в теплоемкость определяется как $C_p = 3Rz$ и равен 224.37 Дж/моль · К, где z – количество атомов на формульную единицу, R – универсальная газовая постоянная. Экспериментально при $T = 300$ К достигается 70 % этой величины. Обработка решеточного вклада дает температуры Дебая $T_D = 551 \pm 20$ К и 564 ± 20 К для $x = 0.2$ и 0.4 соответственно, которые согласуются со значениями для людвицитов разных составов [18, 26, 27].

Учитывая сложность кристаллических структур, содержащих множество неэквивалентных кристаллографических позиций и связанных с ними магнитных подрешеток, можно ожидать, что магнитное поведение будет определяться величиной и знаком обменных взаимодействий, которые, как следует из анализа магнитной восприимчивости, носят преимущественно антиферромагнитный характер.

Выводы. Методом спонтанной кристаллизации и твердофазной реакции получены оксиды бораты со структурами людвигит (Mg_2MnBO_5), халсит ($\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{BO}_5$) и ортопинакиолит ($\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{BO}_5$). Материалы относятся к семейству боратов “обойного типа 3 Å”, кристаллическая структура которых построена из двух подсистем. Первая подсистема является катионно-упорядоченной и состоит из катионов в нечетных октаэдрических позициях (M1, M3, M5, M7), разделенных наибольшим межкатионным расстоянием. Вторая – сформирована октаэдрами в четных позициях (M2, M4, M6).

Ряд из N октаэдров ($N = 3, 5, \dots \infty$) формирует триаду (людвигит), пентаду (ортопинакиолит) и бесконечную стенку (халсит). Внутри этого катионно-неупорядоченного комплекса катионы разделены межкатионным расстоянием менее $3 \text{ \AA}$. Согласно расчетам валентных состояний, позиция М5 в халсите и ортопинакиолите занята ионами Mn^{3+} . В людвигите увеличение валентности в позиции Мп4 ($2.91+$) согласуется с фактором заполнения трехвалентными ионами ($\text{SOF} = 73\%$). Валентное состояние ионов марганца в позициях М2 и М4 принимает значения 2.42 – 2.47 вал. ед. (валентных единиц), указывая на присутствие ионов Mn^{2+} и Mn^{3+} одновременно. По мере замещения ионов Mg^{2+} ионами Mn^{2+} концентрация таких состояний растет. Наконец, валентность ионов магния лежит внутри интервала ожидаемых значений (1.93 – 2.23 вал. ед.).

Таким образом, наряду с людвигитами, бораты со структурой халсита и ортопинакиолита следует рассматривать как системы со смешанной валентностью. Большой интерес представляет исследование данных материалов на предмет структурных фазовых переходов, связанных с упорядочением локальных октаэдрических искажений. Измерения статической намагниченности и теплоемкости выполнены впервые и показали, что все изученные образцы демонстрируют преобладание антиферромагнитных обменных взаимодействий. При охлаждении исследуемые оксидобораты испытывают фазовые переходы, вызванные упорядочением и последующим замерзанием магнитных моментов в нескольких магнитных подрешетках. В материалах $(\text{Mg}_{2-x}\text{Mn}_{1+x}\text{BO}_5)$, $x = 0.2$ и 0.4) обнаруживаются аномалии теплоемкости, связанные с магнитными переходами.

Измерения кристаллической структуры и магнитных свойств выполнены с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Измерения теплоемкости проведены на базе Центра коллективного пользования Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (Москва, Россия).

Финансирование работы. Исследование кристаллической структуры поликристаллического образца Mg_2MnBO_5 выполнено в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН (Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук).

Синтез, исследования магнитных свойств и теплоемкости выполнены за счет средств гранта Российского научного фонда # 24-12-20012, <https://rscf.ru/project/24-12-20012/> и Красноярского краевого фонда науки.

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

1. P. Bordet and E. Suard, Phys. Rev. B **79**(14), 144408 (2009).
2. R. B. Guimaraes, M. Mir, J. C. Fernandes, M. A. Continentino, H. A. Borges, G. Cernicchiaro, M. B. Fontes, D. R. Candela, and E. Baggio-Saitovitch, Phys. Rev. B **60**(9), 6617 (1999).
3. R. Pradip, P. Piekarz, D. Merkel, J. Kalt, O. Waller, A. I. Chumakov, R. Rüffer, A. M. Oles, K. Parlinski, T. Baumbach, and S. Stankov, Nanoscale **11**(22), 10968 (2019).
4. C. E. Webb, J. Inst. Electr. Eng. **82**(495), 303 (1938).
5. A. Taraphder, J. Phys.: Condens. Matter **19** (12), 125218 (2007).
6. J. Q. Yan, J. S. Zhou, J. G. Cheng, J. B. Goodenough, Y. Ren, A. Llobet, and R. J. McQueeney, Phys. Rev. B **84**(21), 214405 (2011).
7. M. Angst, P. Khalifah, R. P. Hermann, H. J. Xiang, M. H. Whangbo, V. Varadarajan, J. W. Brill, B. C. Sales, and D. Mandrus, Phys. Rev. Lett. **99**(8), 086403 (2007).
8. I. Mitov, Z. Cherkezova-Zheleva, V. Mitrov, and B. Kunev, J. Alloys Compd. **289**(1), 55 (1999).
9. M. Mir, R. B. Guimaraes, J. C. Fernandes, M. A. Continentino, A. C. Doriguetto, Y. P. Mascarenhas, J. Ellena, E. E. Castellano, R. S. Freitas, and L. Ghivelder, Phys. Rev. Lett. **87**(14), 147201 (2001).
10. M. Mir, J. Janczak, Y. P. Mascarenhas, J. Ellena, E. E. Castellano, R. S. Freitas, and L. Ghivelder, J. Appl. Crystallogr. **39**(1), 42 (2006).
11. A. Utzolino and K. Bluhm, Z. Naturforsch. B **51**(10), 1433 (1996).
12. J. J. Cooper and R. J. D. Tilley, J. Solid State Chem. **97**(2), 452 (1992).
13. E. Moshkina, Y. Seryotkin, A. Bovina, M. Molokeev, E. Eremin, N. Belskaya, and L. Bezmaternykh, J. Cryst. Growth **503**, 1 (2018).
14. J. Bartolomé, A. Arauzo, N. V. Kazak, N. B. Ivanova, S. G. Ovchinnikov, Yu. V. Knyazev, and I. S. Lyubutin, Phys. Rev. B **83**(14), 144426 (2011).
15. R. Norrestam, K. Nielsen, I. Sotofte, and N. Thorup, Z. Kristallogr. **189**(1–2), 33 (1989).
16. I. D. Brown and D. Altermatt, Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci. **41**(4), 244 (1985).
17. R. Norrestam and J. O. Bovin, Z. Kristallogr. Cryst. Mater. **181**(1–4), 135 (1987).
18. N. V. Kazak, M. S. Platunov, Yu. V. Knyazev, N. B. Ivanova, O. A. Bayukov, A. D. Vasiliev, L. N. Bezmaternykh, V. I. Nizhankovskii, S. Yu. Gavrilkin, K. V. Lamonova, and S. G. Ovchinnikov, J. Magn. Mater. **393**, 316 (2015).

19. N. V. Kazak, M. S. Platunov, Yu. V. Knyazev, E. M. Moshkina, L. A. Solovyov, S. N. Vereshchagin, Yu. L. Mikhlin, A. A. Veligzhanin, A. L. Trigub, and S. G. Ovchinnikov, *Physica B* **560**, 228 (2019).
20. M. Matos and R. B. Oliveira, *Int. J. Quantum Chem.* **106**, 2737 (2006).
21. S. R. Bland, M. Angst, S. Adiga, V. Scagnoli, R. D. Johnson, J. Herrero-Martín, and P. D. Hatton, *Phys. Rev. B* **82**(11), 115110 (2010).
22. M. Angst, R. P. Hermann, W. Schweika, J.-W. Kim, P. Khalifah, H. J. Xiang, M.-H. Whangbo, D. H. Kim, B. C. Sales, and D. Mandrus, *Phys. Rev. Lett.* **99**(25), 1256402 (2007).
23. A. P. Douvalis, V. Papaefthymiou, A. Moukarika, and T. Bakas, *Hyperfine Interact.* **126**(1), 319 (2000).
24. N. V. Kazak, N. A. Belskaya, E. M. Moshkina, L. N. Bezmaternykh, A. D. Vasiliev, S. N. Sofronova, R. M. Eremina, E. V. Eremin, A. R. Muftakhutdinov, M. A. Cherosov, and S. G. Ovchinnikov, *J. Magn. Magn. Mater.* **507**, 166820 (2020).
25. Yu. V. Knyazev, N. V. Kazak, V. S. Zhandun, J. Bartolomé, A. Arauzo, N. A. Belskaya, O. A. Bayukov, L. N. Bezmaternykh, and S. G. Ovchinnikov, *Dalton Trans.* **50** (28), 9735 (2021).
26. N. A. Belskaya, E. V. Eremin, A. D. Vasiliev, S. Yu. Gavrilkin, S. N. Vereshchagin, D. S. Chikurov, A. A. Krasilin, and N. V. Kazak, *J. Magn. Magn. Mater.* **604**, 172298 (2024).
27. N. V. Kazak, M. S. Platunov, Yu. V. Knyazev, M. S. Molokeev, M. V. Gorev, S. G. Ovchinnikov, Z. V. Pchelkina, V. V. Gapontsev, S. V. Streltsov, J. Bartolomé, A. Arauzo, V. V. Yumashev, S. Yu. Gavrilkin, F. Wilhelm, and A. Rogalev, *Phys. Rev. B* **103**, 094445 (2021).
28. D. A. Velikanov, *Inorg. Mater. Appl. Res.* **11**(4), 801 (2020).

Связанные состояния магнитных скирмионов высокого порядка и сверхпроводящего вихря Пирла

А. Д. Федосеев⁺, М. С. Шустин^{†*1)}, Д. М. Дзедзисавили⁺

⁺Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

^{*}Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Россия

Поступила в редакцию 6 августа 2024 г.

После переработки 6 сентября 2024 г.

Принята к публикации 6 сентября 2024 г.

Показано, что поля рассеяния сверхпроводящего вихря Пирла могут формировать связанные состояния с магнитными скирмионами высокого порядка за счет орбитальных эффектов неоднородного магнитного поля. По аналогии с недавними результатами для скирмионов с топологическим зарядом $|Q| = 1$ [E. S. Andriyakhina, S. Apostoloff, and I. S. Burmistrov, *Pis'ma v ZhETF* **116**, 801 (2022)], в таких связанных состояниях центры магнитных скирмионов высокого порядка могут быть смещены относительно центра сверхпроводящего вихря на некоторое расстояние. Показано, что для простейших магнитных скирмионов высокого порядка с $|Q| = 2$ действующие на магнитные скирмионы высокого порядка пандеромоторные силы всегда стремятся сформировать некоаксиальные связанные состояния.

DOI: 10.31857/S0370274X24100097, EDN: IYTNLL

1. Введение. Скирмионы представляют собой топологически нетривиальные полевые конфигурации, являющиеся решениями нелинейных дифференциальных уравнений физики. Впервые такие решения рассмотрел Т. Скирм в ядерной физике для барионного поля [1, 2]. В дальнейшем, аналогичные распределения поля намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ были найдены в 2D магнитных системах [3, 4], для которых полагалось, что $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ осуществляет отображение $S^2 \rightarrow S^2$. Практический интерес к магнитным скирмионам обусловлен их так называемой топологической устойчивостью, а именно невозможностью перевести нетривиальное распределение $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ с топологическим индексом/зарядом Q в распределение, отвечающее другому значению Q , без преодоления энергетического барьера. До последнего времени в большинстве исследований рассматривались магнитные скирмионы (МС) с $Q = -1$. Однако недавно в ходе численных и физических экспериментов были обнаружены другие магнитные вихри: скирмиониумы [5], скирмионы высокого порядка [6, 7], скирмионные мешки [8–11], бискирмионы [12] и т.д. Перечисленные структуры могут нести топологический заряд $|Q| \neq 1$ за счет различных особенностей спиновых текстур. Благодаря их относительно малым размерам, топологической устойчивости и морфологическому разнообразию, такие метастабильные кон-

фигурации рассматриваются в качестве перспективных для создания устройств логики и памяти нового поколения [13–15].

Наиболее часто рассматриваемым механизмом стабилизации топологических магнитных структур является киральное взаимодействие Дзялошинского–Мории (Д-М), возникающее в системах без центра инверсии. Кроме него, были предложены механизмы, обусловленные: магнитодипольными нелокальными взаимодействиями [7], фрустрированными обменными связями [6, 16], гибридизацией между локализованной магнитной и коллективизированной электронной подсистемами [12, 17]. Недавно авторами был предложен дополнительный механизм стабилизации 2D магнитных скирмионов высокого порядка (МСВП) с $|Q| > 1$, за счет орбитальных эффектов неоднородного магнитного поля [18, 19]. Орбитальные эффекты индуцируют в магнитном энергетическом функционале так называемое скалярное киральное взаимодействие (СКВ) [20, 21], плотность которого пропорциональна произведению компоненты магнитного поля $H_z(\mathbf{r})$, приложенной перпендикулярно плоскости магнитной пленки, на плотность топологического заряда конфигурации

$$\rho(\mathbf{r}) = \left(\mathbf{m} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right] \right), \quad Q = \int_{\mathbb{R}^2} \rho(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r}. \quad (1)$$

¹⁾e-mail: mshustin@yandex.ru

В случае пространственно-однородных полей такой вклад в функционал приводит к понижению энергии МС определенной киральности ($Q = +1$ или $Q = -1$ в зависимости от знака константы СКВ, см. ниже) по сравнению с энергией скирмионов противоположной киральности. Для малых МС такой отрицательный сдвиг энергии может быть сопоставим с положительным обменным вкладом, запасенным в МС, и формировать тенденцию к их стабилизации. Однако, в однородном поле вклад от СКВ не зависит от размеров и морфологии скирмионов. Для неоднородных полей СКВ может индуцировать новые магнитные структуры, включая МСВП. В работах [18, 19] рассматривались аксиально-симметричные магнитные поля со степенной зависимостью напряженности поля от расстояния, $H_z(r) \sim r^\beta$. При этом пренебрегалось продольными компонентами $H_r(r)$, направленными вдоль радиальной переменной полярной системы координат, а центр МСВП лежал на оси вращения поля.

С другой стороны, в недавней серии работ [22–25] было продемонстрировано, что неоднородные поля рассеяния сверхпроводящего вихря (СВ) Пирла, кроме факта формирования связанной пары МС–СВ, существенно влияют на характеристики магнитных скирмионов с $|Q| = 1$. Например, такие поля могут стабилизировать аксиально-несимметричные связанные конфигурации, в которых центры МС и СВ смещены друг относительно друга на ненулевое расстояние a [22, 23]. Кроме того, влияние полей рассеяния может существенно сказываться на размерах МС, приводить к изменению его киральности (смене знака Q), и деформировать спиновую текстуру МС [24, 25]. В отмеченных эффектах важную роль играет продольная компонента магнитного поля вихря Пирла $H_r(\mathbf{r})$, взаимодействие которого с МС наиболее существенно в области доменной стенки последних.

Идея настоящей работы лежит на стыке исследований [18, 19] и [22–25]: мы рассматриваем вопрос формирования связанной пары МСВП–СВ, но возникающей за счет влияния орбитальных эффектов полей рассеяния сверхпроводящего вихря Пирла. Стоит отметить, что исследование связанных состояний магнитных и сверхпроводящих вихрей в последнее время актуализировалось в контексте поиска на таких парах майорановских мод [26, 27]. Так, было показано, что в планарных гибридных структурах сверхпроводник–ферромагнетик майорановские моды могут локализоваться на магнитных вихрях, например, если: i) последние являются МСВП [28]; ii) сформирована связанная пара МС–СВ [29]. В на-

стоящей работе будет показано, что поле рассеяния сверхпроводящего вихря может привести к возникновению связанной пары другого типа, МСВП–СВ.

2. Энергия магнитных скирмионов в поле вихря Пирла. Рассмотрим модель квазидвумерной гибридной структуры сверхпроводник II рода/ферромагнетик с треугольной решеткой. Будем считать, что в сверхпроводнике реализовался СВ Пирла. Его размеры определяются размерами ядра вихря порядка длины когерентности ξ в СП пленке и эффективной глубиной проникновения $\lambda = \lambda_L^2/d$, связанной с лондоновской глубиной проникновения λ_L и толщиной пленки d . В ферромагнитной пленке будем предполагать существование топологических магнитных вихрей типа МС с характерными радиусом R и шириной доменной стенки w . Будем считать, что реализуется следующая иерархия размеров сверхпроводящего и магнитного вихрей: $\lambda \gg R, w, \xi$ и $R \gg \xi$. Соответственно, при описании взаимодействия между сверхпроводящим и магнитными вихрями будем учитывать лишь влияние первого на последние, игнорируя обратное влияние. Также пренебрежем сверхпроводящим эффектом близости, считая, что СВ действует на магнитные скирмионы лишь посредством аксиально-симметричных полей рассеяния вихря: $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = H_z(\rho, z) \cdot \mathbf{e}_z + H_\rho(\rho, z) \cdot \mathbf{e}_\rho$. Здесь и далее посредством $\rho = [(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2]^{1/2}$ обозначена радиальная переменная полярной системы координат с началом в точке $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, 0)$, совпадающим с центром СВ. Если считать, что СВ действует на магнитную пленку в области $z \rightarrow 0_+$, тогда компоненты магнитного поля в области $\rho \gg \xi$ можно представить в виде [30] ($H_{z/\rho}(\rho) = H_{z/\rho}(\rho, z \rightarrow 0_+)$):

$$H_{z/\rho}(\rho) = \frac{s_H \Phi_0}{2\pi} \int_0^\infty \frac{q J_{0/1}(q\rho)}{1 + 2q\lambda} dq, \quad (2)$$

где Φ_0 – квант магнитного потока, $s_H = \pm 1$ отвечает за направление поля по отношению к направлению намагниченности пленки вдали от вихря, $J_{0/1}$ – функция Бесселя порядка 0 или 1. Далее, это выражение удобно привести к форме, явно демонстрирующей его асимптотическое поведение

$$H_{z/\rho}(\rho) = \frac{s_H \Phi_0}{4\pi\lambda} \left[\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\lambda} \int_0^\infty e^{-\nu t - \frac{\rho}{2\lambda} \sinh(t)} dt \right] \cong \frac{s_H \Phi_0}{4\pi\lambda} \frac{1}{\rho}, \quad (3)$$

где $\nu = 0, 1$ для компонент H_z, H_ρ , соответственно. Вследствие двойной экспоненциальной зависимо-

сти подинтегрального выражения (3) от t , поправки к зависимости $H_{z/\rho} \sim 1/\rho$ оказываются меньше нескольких процентов в диапазоне $\xi \ll \rho < \lambda/3$. При $\rho > \lambda/3$ отклонения от такой зависимости растут, однако в этом случае величина самого поля становится слабой. В области ядра СП вихря, $\rho \lesssim \xi$, поведение поля отличается от представленного выражениями (2), (3). Однако, ввиду малости ξ по сравнению с радиусом МС, пространственная область ядра СВ не будет вносить существенного вклада в энергию возбуждения скирмионов (4)–(9). Это позволяет экстраполировать зависимость поля $H_{z/\rho} \sim 1/\rho$ также на область вблизи ядра СВ $\rho \lesssim \xi$.

Соответственно, в дальнейшем мы будем считать, что обе компоненты поля, $H_{z/\rho} \sim s_H/\rho$ во всей области определения ρ , т.е. будем использовать зависимость, приведенную в правой части выражения (3). Важно отметить, что возникающая при такой аппроксимации расходимость напряженности поля при $\rho = 0$ является интегрируемой в случае двумерных пленок. Таким образом, при отмеченной аппроксимации мы заменяем один малый конечный вклад в энергию МСВП от области ядра вихря другим.

Энергию возбуждения МС с профилем $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ над ферромагнитным состоянием, $m_z \equiv 1$, будем описывать в рамках классического функционала:

$$E = E_J + E_A + E_D + E_K + E_Z, \quad (4)$$

со следующими энергетическими вкладами, см. [18]:

$$E_J = \frac{\sqrt{3}S^2\mathcal{J}}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \sum_{\mu=x,y,z} (\nabla \mathbf{m}_\mu)^2 ds, \quad (5)$$

$$E_A = \frac{2S^2\mathcal{A}}{\sqrt{3}} \int_{\mathbb{R}^2} (1 - m_z^2) ds, \quad (6)$$

$$E_D = \sqrt{3}S^2\mathcal{D} \int_{\mathbb{R}^2} (m_z \cdot (\nabla \mathbf{m}) - (\mathbf{m} \nabla) \cdot m_z) ds, \quad (7)$$

$$E_K = S^3 \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{K}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \cdot \left(\mathbf{m} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right] \right) ds, \quad (8)$$

$$E_Z = \frac{2Sg\mu_B}{\sqrt{3}} \int_{\mathbb{R}^2} (H_z - \mathbf{H}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \cdot \mathbf{m}) ds, \quad (9)$$

где $|\mathbf{m}| = 1$, $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, 0)$, $ds = dx dy$, S – величина спина магнитоактивных ионов. Все длины измеряются в единицах параметра решетки. Слагаемое E_J описывает обменное взаимодействие магнитоактивных ионов с амплитудой $\mathcal{J} > 0$; вклад E_A – анизотропию типа “легкая ось” с $\mathcal{A} > 0$; E_D – взаимодействие Д-М амплитуды $\mathcal{D} > 0$, в котором вектор Д-М направлен перпендикулярно связям, соединяющим соседние ионы. Слагаемые (5) и

(7) определяются внутренними взаимодействиями в пленке/гетероструктуре, тогда как вклад анизотропии (6) может быть обусловлен как кристаллическими полями, так и эффективно индуцирован диполь-дипольными взаимодействиями [22, 31, 32]. Ввиду того, что магнитостатические эффекты в тонких пленках можно свести к ренормировкам параметра анизотропии $\mathcal{A}$, мы в настоящей работе не учитываем вклад в функционал (4) от диполь-дипольных взаимодействий.

Слагаемое E_Z описывает зеемановские эффекты взаимодействия скирмионов с полем СВ. Вклад E_K , описывающий скалярное киральное взаимодействие, пропорционален пространственному интегралу от $\rho(\mathbf{r})$, см. выражение (1), с ядром:

$$\mathcal{K}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) = K \cdot \sin(\pi \Phi_\Delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)/\Phi_0), \quad (10)$$

где Φ_Δ – поток компоненты магнитного поля H_z через элементарный плакет треугольной решетки. Его происхождение связано с орбитальными эффектами магнитного поля. Так, выражение (8) и явный вид константы $\mathcal{K}$ могут быть получены для модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций в третьем порядке теории возмущений по параметру t/U при учете орбитальных эффектов [18, 20, 21].

Выражения (4)–(8) представляют собой континуальную версию решеточного энергетического функционала на треугольной решетке, полученную ранее при рассмотрении эффективных взаимодействий в двумерных мотт-хаббардовских изоляторах. Было показано [18], что в режиме сильных электронных корреляций реализуется иерархия эффективных взаимодействий, $\mathcal{J} \gg \mathcal{D} \sim \mathcal{K} \gg \mathcal{A}$, которой мы будем придерживаться в настоящей работе.

Аксиально-симметричные МС и МСВП будем описывать в рамках стандартной параметризации:

$$m_x = \sin \theta \cos n\phi; \quad m_y = \sin \theta \sin n\phi; \quad m_z = \cos \theta, \quad (11)$$

где так называемый скирмионный угол $\theta(r)$, зависит от радиальной переменной r полярной системы координат, отсчитанной от центра скирмиона; ϕ – азимутальный угол такой системы координат. Параметр завихренности, n – “vorticity”, скирмионной текстуры связан с ее топологическим зарядом соотношением $n = -Q$. Геометрия взаимного расположения СВ и МСВП представлена на рис. 1. Там же схематически изображена азимутальная зависимость проекции спинового профиля МСВП с $n = 2$ на плоскость ХоУ. Важно отметить, что введением азимутального угла ϕ_0 , определяющего взаимную ориентацию СВ и магнитного вихрей, см. рис. 1, мы эффективно задали

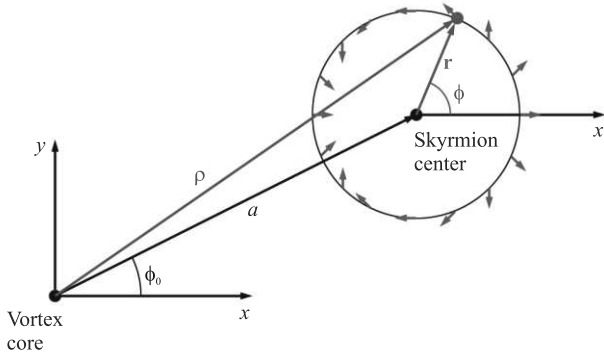


Рис. 1. (Цветной онлайн) Геометрия взаимного расположения сверхпроводящего вихря и магнитного скирмиона с фиксированной спиновой текстурой, задаваемой параметризацией (11). Для МСВП с $n \neq 1$ энергия взаимодействия скирмиона с вихрем зависит от расстояния между центрами a , и от угла ϕ_0 , задающих взаимное расположение СВ и МСВП

спиральность (“helicity”) скирмионов, а потому параметр спиральности отсутствует в (11).

Подставляя параметризацию (11) в выражения для энергетических вкладов (5)–(7), последние представляются в виде стандартных радиальных интегралов:

$$E_J = J \int_0^\infty \left[\left(\frac{d\theta}{dr} \right)^2 + n^2 \left(\frac{\sin \theta}{r} \right)^2 \right] r dr, \quad (12)$$

$$E_A = A \int_0^\infty r \sin^2 \theta dr, \quad (13)$$

$$E_D = D \delta_{n1} \int_0^\infty \left[\frac{d\theta}{dr} + \frac{\sin(2\theta)}{2r} \right] r dr, \quad (14)$$

где $J = S^2 \pi \sqrt{3} \mathcal{J}$, $A = 4\pi S^2 \mathcal{A} / \sqrt{3}$, $D = 4S^2 \sqrt{3} \pi \mathcal{D}$. Вклады в функционал от $E_J + E_A$ стремятся уменьшить радиус и ширину доменных стенок скирмионов, приводя к их коллапсу. Напротив, взаимодействие Д-М, E_D , стремится увеличить радиус, стабилизируя МС. Однако, последнее дает ненулевой вклад лишь для МС с $n = 1$, вследствие вида азимутальной зависимости профиля $\mathbf{m}(\mathbf{r})$, заданной в (11).

Для аналитического описания эффектов СКВ предположим, что пространственные области вблизи центра СВ вихря, для которых $\pi\Phi_\Delta \gtrsim \Phi_0$, незначительно влияют на особенности стабилизации МСВП, в виду малости таких областей. Это предположение было подтверждено численными расчетами. В этом случае ядро интеграла трехспинового взаимодействия (10) можно упростить, заменив синус его аргументом. Тогда, выражения для вкладов магнит-

ного поля в энергию возбуждения МСВП, после интегрирования по азимутальной переменной ϕ , примут вид:

$$E_K = s_H \frac{K_c n}{\lambda} \int_0^\infty \frac{(d\theta/dr) \sin \theta}{r+a} K \left(\frac{4ar}{(r+a)^2} \right) dr, \quad (15)$$

$$E_Z = -s_H \frac{H_c}{\lambda} \int_0^\infty dr \left[\frac{4r}{r+a} (\cos \theta - 1) K \left(\frac{4ar}{(r+a)^2} \right) + 2\pi \frac{\sin \theta \cos(n-1)\phi_0}{(r/a)^{n-1}} (-1)^{n-1} s_n \Theta(s_n(r-a)) \right], \quad (16)$$

$$K(z) = \int_0^{\pi/2} (1 - z \sin^2 \chi)^{-1/2} d\chi, \quad (17)$$

где $K_c = \frac{\sqrt{3}}{4} K S^3$, $\Theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда, $s_n = \text{sign}(n)$ и $s_0 = -1$, $K(z)$ – полный эллиптический интеграл первого рода. Поле H_c определено выражением:

$$H_c = \frac{\Phi_0 \mu_B}{2\pi \sqrt{3} a^2} \cdot gS \approx 1.094 \frac{eV}{(a(\text{\AA}))^2} \cdot gS. \quad (18)$$

Выражение для орбитальных вкладов E_K , а также первая строчка выражения для зеемановских вкладов E_Z , описывают взаимодействие МСВП с поперечными компонентами магнитного поля H_z . Вторая строчка (16) описывает взаимодействие с продольными компонентами H_r . В обоих выражениях (15) и (16), кроме зависимости от профиля скирмионного угла $\theta(r)$ и индекса завихренности n , возникла зависимость от параметров, описывающих взаимное расположение СВ и МС: расстояния, a , между их центрами, и относительного угла поворота ϕ_0 . Из (16) видно, что в коаксиальном случае, $a = 0$, зависимость от радиальных компонент поля исчезает. Такой случай изучался в работах [18, 19].

Производные $\partial E_Z / \partial a$ и $\partial E_Z / \partial \phi_0$ пропорциональны, соответственно, радиальной и азимутальной компонентам равнодействующих пандеромоторных сил, воздействующих на МСВП. Из (16) видно, что при $n \neq 1$ выделяются направления, при которых азимутальные компоненты пандеромоторных сил на МСВП не действуют. Тогда скирмионы будут располагаться на лучах, направленных вдоль отмеченных направлений, которые задаются углами:

$$\bar{\phi}_0^{(n)} = \left(1 + \frac{1 - s_H + 4m}{2(n-1)} \right) \pi \pmod{2\pi}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (19)$$

Например, в случае $s_H = -1$, т.е. для поля противоположно направленного намагниченности насыщения ферромагнитной пленки (см. следующий раздел), будем иметь: $\bar{\phi}_0^{(2)} = 0$; $\bar{\phi}_0^{(3)} = \pm\pi/2$; $\bar{\phi}_0^{(4)} = \{0, \pm 2\pi/3\}$.

Из выражения (16) нетрудно показать, что в случае $n = 2$ $(\partial E_Z / \partial a)|_{a \rightarrow 0} \rightarrow \beta_r(\phi_0)$, при том, что константа $\beta_r = \beta_r(\bar{\phi}_0^{(n)}) < 0$. Последнее означает, что для простейших скирмионов высокого порядка с $n = 2$ пандеромоторные силы *всегда* стремятся разрушить коаксиальную связанную пару МСВП–СВ.

3. Стабилизация МСВП за счет трехспинового взаимодействия. В этом разделе обсудим механизм стабилизации МСВП за счет совместного влияния зеемановских и орбитальных эффектов магнитного поля. Рассмотрение функционала (12)–(16) будем проводить в рамках вариационного подхода, в котором скирмионный угол $\theta(r)$ описывается двухпараметрическим анзацем 2π -доменной стенки [33]:

$$\theta(r) = 2 \arctan \left(\frac{\cosh(R/w)}{\sinh(r/w)} \right), \quad (20)$$

где параметр R определяет радиус скирмиона, для которого $m_z|_{r=R} \cong 0$, $|w|$ — ширину доменной стенки, а знак w отвечает за киральность скирмиона. При выборе такого анзаца мы пренебрегли искажениями текстуры МСВП за счет поля СВ, см. [24, 25].

Рассмотрим сначала ситуацию в отсутствии зеемановских слагаемых, E_Z (16), и ограничимся случаем $n > 0$. Предположим, что $R \gg w \gg 1$ и, следуя работе [33], аппроксимируем функции скирмионного угла дельта-функциями: $d\theta/dr \sim \sin \theta \sim \delta(r - R)$. Далее, учтем, что при иерархии энергетических параметров, $J \gg K_c \gg A$, H_c выполняется соотношение $R \approx n w$ [18, 19]. Тогда, найдем приближенный вид энергетического функционала:

$$\tilde{E} \approx 4Jn + \frac{2A}{n} R^2 - \frac{2s_H K_c n}{\lambda R} \cdot \frac{1}{1+x} K \left(\frac{4x}{(1+x)^2} \right), \quad (21)$$

$$x = a/R > 0.$$

Такие приближения дают полуколичественное описание при $n > 2$ и качественное при $n = 2$.

Из рассмотрения (21) видно, что вклады в энергию от обменного взаимодействия и анизотропии положительны, и стремятся сжать размер скирмиона до минимального значения $R = 0$. Энергия трехспинового взаимодействия в зависимости от знака $s_H K_c n$ будет или всегда отрицательной, или всегда положительной, поскольку $K(z) > 0$. В первом случае минимуму (21) будет отвечать решение с $R = 0$, а потому скирмион не будет стабилизироваться. Со-

ответственно, для стабилизации МСВП нужно рассматривать ситуацию $s_H K_c n < 0$. В рассматриваемом нами случае $K_c > 0$ и $n > 0$ это означает $s_H = -1$, а значит поле вихря Пирла должно быть направлено противоположно намагниченности насыщения ферромагнитной пленки.

Проанализируем свойства функционала (21) при $s_H = -1$, рассматривая его как функцию одной переменной — расстояния между вихрем и МСВП: $\tilde{E}_a(a) = \tilde{E}(a, R = \text{const}) \geq 0$. Для малых смещений, раскладывая $\tilde{E}_a$ в ряд по $a \ll R$, найдем:

$$\tilde{E} \approx 4Jn + \frac{2A}{n} R^2 + \frac{\pi^2 K_c n}{4\lambda R} \left[1 + \frac{a^2}{4R^2} + \dots \right]. \quad (22)$$

Видно, что коаксиальный случай, $a = 0$, является локальным минимумом связанной пары МСВП–СВ в пренебрежении зеемановскими эффектами. Малые отклонения от этого локального минимума приводят к квадратичному росту энергии МСВП по параметру a . Дальнейшее увеличение a также приводит к росту $\tilde{E}_a$, и в точке $a = R$ возникает расходимость. Далее, при $a > R$ функция $\tilde{E}_a$ монотонно спадает, так что $\tilde{E}_a(\infty) \rightarrow 4Jn + (2A/n) R^2$. Последнее отвечает ситуации, когда поле СВ не действует на МСВП из-за большого расстояния между ними. Тогда энергии обмена и анизотропии стремятся сколлапсировать скирмион до минимального размера $R = 0$.

Важно отметить, что расходимость $\tilde{E}_a(R)$ при $R = a$ связана с аппроксимацией $d\theta/dr$ и $\sin \theta$ дельта-функциями. При корректном вычислении функционала (15) сингулярность интегрируется и функционал принимает конечное значение, удовлетворяющее соотношению $\tilde{E}_a(R) > \tilde{E}_a(0)$. Таким образом, наличие скалярного кирального взаимодействия приводит к тому, что, при удалении МСВП (с фиксированным спиновым профилем) от центра СВ, системе необходимо пройти через энергетический барьер. Формирование такого барьера за счет СКВ является главной причиной стабилизации связанной пары МСВП–СВ в рассматриваемой модели.

Далее, учтем зеемановские эффекты магнитного поля. В этом случае, ввиду сложности аналитической оценки интегралов (16) сосредоточимся на режиме малых смещений, $a \ll R$. Первая строчка выражения (16), описывающая взаимодействие МСВП с компонентой поля H_z , не зависит от n , и совпадает с вкладом для МС с $n = 1$, рассматриваемым в работе [23]. Для этого случая, при малых смещениях и $s_H = -1$ имеем $E_Z^{(z)} \approx -\beta_0 + \beta_z \cdot (a/R)^2$, где $\beta_{0,z} > 0$. Как видно из (22), при тех же условиях, такого рода зависимость имеет место и для функционала, учитывающего только орбитальные эффекты

поля, $\tilde{E} \approx \alpha_0 + \alpha_z \cdot (a/R)^2$, где коэффициенты разложения положительны. Особенностью рассмотрения МСВП является то, что учет зеемановских вкладов, $E_Z^{(r)}$, приводит к дополнительной зависимости функционала от a : $E_Z^{(r)} \approx -\beta_r(\phi_0) \cdot (a/R)^{n-1}$, $n > 1$. При этом, если $\phi_0 = \tilde{\phi}_0^{(n)}$ из выражения (19), то $\beta_r > 0$. Тогда разложение приближенного энергетического функционала будет выглядеть как:

$$\tilde{E} + \tilde{E}_Z \approx \alpha_0 - \beta_0 - \beta_r \left(\frac{a}{R}\right)^{n-1} + (\alpha_z + \beta_z) \left(\frac{a}{R}\right)^2, \quad (23)$$

$$\alpha_0 = 4Jn + \frac{2A}{n}R^2 + \frac{\pi^2 K_c n}{4\lambda R}; \quad \alpha_z = \frac{\pi^2 K_c n}{16\lambda R^3}; \quad \beta_r = \frac{2\pi^2 H_c}{\lambda n R^{n-2}},$$

где все коэффициенты положительные. Наличие поправок с β_r может существенно модифицировать условия стабилизации МСВП по сравнению со случаем МС с $n = 1$. В частности, из (23) видно, что для наиболее простых МСВП с $n = 2$ коаксиальные конфигурации не будут стабилизироваться, и скирмион будет стремиться сместиться относительно центра вихря на оптимальное расстояние a_* вдоль оси Ox . Из существования максимума зависимости $E_K(a)$ в точке $a \approx R$ следует оценка, $a_* \lesssim R$. Численные расчеты показывают, что $a_* \sim R/2$. Поскольку $R \gg \xi$, то в этом случае формируется некоаксиальная связанная пара, в которой центр МСВП и ядро СВ разнесены на значительное расстояние. Отметим, что зеемановские вклады $E_Z^{(z,r)}$ также ренормируют высоту и положение создаваемого СКВ барьера.

4. Результаты численных расчетов. Обсудив механизмы стабилизации связанных пар МСВП–СВ Пирла и выделив отдельно случай МСВП с $n = 2$, приведем для последнего результаты численного решения вариационной задачи. Вычисления проводились в рамках численной минимизации функционала $E[\mathbf{m}]$ (5)–(9) на квадратной сетке с подстановками (11) и (20). При этом зависимость оптимальной энергии МСВП от расстояния до вихря, a , вычислялась в рамках двух подходов:

- i) *Фиксированные размеры скирмиона.* В этом случае радиус, R_* , и ширина доменной стенки, w_* , МСВП находились в коаксиальной конфигурации, $a = 0$, а затем зависимости энергетических вкладов, $E[\mathbf{m}]$ от a , рассчитывались при фиксированных R_* и w_* . Механизм стабилизации связанных пар МСВП–СВ для такого случая был подробно рассмотрен выше.
- ii) *Адиабатическое приближение.* В этом случае для каждого фиксированного значения параметра смещения a производилась оптимизация

$E[\mathbf{m}]$ по параметрам R и w . При этом размеры МСВП становились зависящими от расстояния от вихря: $R_* = R_*(a)$, $w_* = w_*(a)$.

На рисунке 2 приведены результаты расчетов для: энергии возбуждения МСВП (а), их оптимальных размеров (б), вкладов в энергию МСВП от скалярного кирального взаимодействия E_K (с) и энергии анизотропии E_A (д), построенные как зависимости от расстояния, a , между СВ и МСВП. Энергетические параметры функционала $E[\mathbf{m}]$ выбраны в соответствии с иерархией $J \gg K_c \gg A, H_c$. Штриховыми и сплошными кривыми приведены результаты расчетов согласно подходам i) и ii) соответственно.

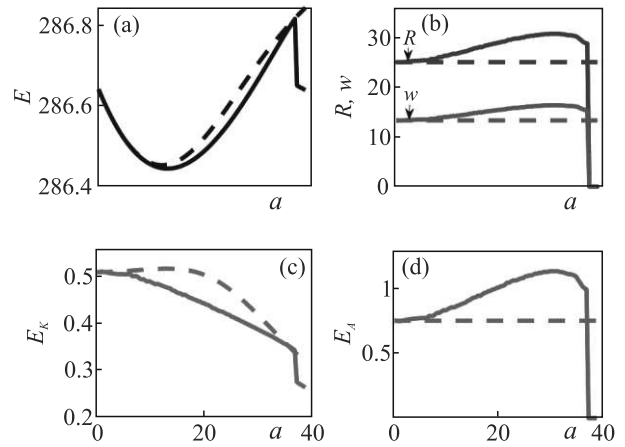


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости от расстояния a , между центрами СВ и МСВП с $n = 2$ энергии возбуждения МСВП E (а), парциальных вкладов от СКВ E_K (с), и одноионной анизотропии E_A (д). В построении (б) приведены зависимости радиуса R и ширины доменной стенки w , МСВП. Штриховые/сплошные кривые отвечают построениям в приближениях i) и ii) соответственно. Все расстояния измеряются в параметрах решетки $\delta = 3 \text{ \AA}$, а энергии – в эВ

Как видно из рис. 2а, в энергии возбуждения МСВП действительно возникает минимум на ненулевом расстоянии a_* , как при адиабатическом, так и неадиабатическом приближениях. В последнем случае возникновение минимума отвечает механизму раздела 3: спадание $E(a)$ за счет радиального зеемановского вклада $E_Z^{(r)} \approx -\beta_r \cdot a$, доминирующего при малых a , при увеличении a сменяется ростом за счет оставшихся слагаемых, зависящих от магнитного поля: $E_K + E_Z^{(z)} \approx \text{const} + (\alpha_z + \beta_z) \cdot (a/R)^2$.

В предположении об адиабатическом изменении расстояния a , качественный вид зависимости $E(a)$ для полной энергии сохраняется, но парциальные вклады от различных взаимодействий могут пере-

распределяться между собой. Наиболее ярко такое перераспределение проявляет себя для вкладов от СКВ E_K , и энергии анизотропии E_A . Действительно, из рассмотрения рис. 2с и d видно, что энергетический барьер зависимости $E_K(a)$, обсуждаемый в разделе 3, в случае адиабатического удаления проявляется в виде барьера зависимости $E_A(a)$. Причиной этого является зависимость обоих вкладов от размеров МСВП. Так, в приближении $R_* = n w_*$, из (21) видно, что $E_{K,A} = E_{K,A}(a, R_*(a))$. При этом, увеличение R_* уменьшает вклад в функционал от скалярного кирального взаимодействия и увеличивает вклад от анизотропии. В результате, системе оказывается выгоднее перераспределить данные энергетические вклады за счет увеличения размеров МСВП, см. рис. 2b.

Важно отметить, что, хотя картина формирования аксиально-несимметричной связанной пары МСВП–СВ в случае ii) выглядит более сложной, чем в приближении i), главной причиной формирования такой пары в обоих случаях является существование минимума (при $a \lesssim R$) и максимума (при $a \approx R$) зависимости $E(a)$ за счет орбитальных и зеемановских эффектов взаимодействия МСВП с полем вихря Пирла. Также обратим внимание, что в случае ii) наблюдаются скачки зависимостей, представленных на рис. 2. Их возникновение связано с тем, что при $a > a_{cr} \sim R$ скалярное киральное взаимодействие не стабилизирует МСВП, приводя к его коллапсу.

5. Заключение. В работе рассмотрен вопрос стабилизации связанных пар МСВП–СВ Пирла при учете конкуренции орбитальных и зеемановских эффектов полей рассеяния сверхпроводящего вихря. Такая постановка задачи является естественным продолжением исследований авторов [18, 19] и рассматривает устойчивость МСВП в неоднородных магнитных полях при учете возможности взаимного смещения сверхпроводящего и магнитного вихрей. При этом, в отличие от родственных исследований [22–25], в качестве механизма стабилизации связанной пары скирмион–СВ мы рассмотрели орбитальные эффекты полей рассеяния последнего, которые проявляют себя в индуцировании скалярного кирального взаимодействия.

В рамках вариационного подхода для магнитного энергетического функционала, описывающего обменное взаимодействие, одноионную анизотропию и воздействие на систему полей рассеяния сверхпроводящего вихря, показано, что МСВП могут образовывать связанные пары с СВ Пирла, если поле последнего направлено противоположно направлению намагнитченности насыщения пленки. Главным ме-

ханизмом такой стабилизации оказалась конкуренция одноионной анизотропии, обменного и скалярного кирального взаимодействий, создающих энергетические барьеры на путях коллапсирования скирмионов в их параметрическом пространстве. Дополнительная конкуренция с зеемановскими эффектами магнитного поля создает возможность стабилизации некоаксиальных связанных пар МСВП–СВ. Более того, показано, что для простейших МСВП с индексом кручений $n = 2$ конкуренция орбитальных и зеемановских вкладов *всегда* приводит к некоаксиальным связанным парам при стабилизации МСВП.

В заключение отметим, что в дальнейшем было бы интересно проанализировать описанные эффекты при учете искажений спиновых текстур МСВП, подробно рассмотренных в работах [24, 25] в случае $n = 1$. Также отдельной численной задачей видится микромагнитное моделирование описанных систем, поскольку в настоящее время стандартные пакеты (например, ООММФ [34]) не оптимизированы для расчета скалярного кирального взаимодействия.

Авторы благодарят И. С. Бурмистрова, С. С. Апостолова и Е. С. Андрияхицу за важные дискуссии. Шустин М. С. благодарит М. Н. Поткину за знакомство с экзотическими магнитными вихрями и работой [33].

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания Института физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук. Шустин М. С. благодарит за поддержку Фонд развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

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

1. T. H. R. Skyrme, Proc. R. Soc. Lond. Ser. A **260**, 127 (1961).
2. T. H. R. Skyrme, Nucl. Phys. **31**, 556 (1962).
3. А. А. Белавин, А. М. Поляков, Письма из ЖЭТФ **22**, 503 (1975).
4. A. N. Bogdanov and D. A. Yablonsky, Sov. Phys. JETP **95**, 178 (1989).
5. B. Seng, D. Schonke, J. Yeste et al. (Collaboration), Adv. Func. Mat. **31**, 2102307 (2021).
6. L. Rózsa, K. Palotás, A. Deák, E. Simon, R. Yanes, L. Udvardi, L. Szunyogh, and U. Nowak, Phys. Rev. B **95**, 094423 (2017).
7. M. Hassan, S. Koraltan, A. Ullrich, F. Bruckner, R. O. Serha, K. V. Levchenko, G. Varvaro, N. S. Kiselev, M. Heigl, C. Abert, D. Suess, and M. Albrecht, Nature Physics. **20**, 615 (2024).

8. F. Rybakov and N. Kiselev, Phys. Rev. B **99**, 064437 (2019).
9. V.M. Kuchkin, B. Barton-Singer, F.N. Rybakov, S. Blugel, B.J. Schroers, and N. Kiselev, Phys. Rev. B **102**, 144422 (2020).
10. J. Tang, Y. Wu, W. Wang, L. Kong, B. Lv, W. Wei, J. Zang, M. Tian, and H. Du, Nat. Nanotechnol. **16**, 1086 (2021).
11. L. Yang, A.S. Savchenko, F. Zheng, N.S. Kiselev, F.N. Rybakov, X. Han, S. Blügel, and R.E. Dunin-Borkowski, Adv. Mater. **36**, 2403274 (2024).
12. D.S. Kathyat and P. Sengupta, arXiv:2405.19987 (2024).
13. S.S.P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science **320**, 190 (2008).
14. S.S.P. Parkin and S.-H. Yang, Nat. Nanotechnol. **10**, 195 (2015).
15. C. Psaroudaki, E. Peraticos, and C. Panagopoulos, Appl. Phys. Lett. **123**, 260501 (2023).
16. A. Leonov and M. Mostovoy, Nat. Commun. **6**, 8275 (2015).
17. R. Ozawa, S. Hayami, and Y. Motome, Phys. Rev. Lett. **118**, 147205 (2017).
18. M.S. Shustin, V.A. Stepanenko, and D.M. Dzebisashvili, Phys. Rev. B **107**, 195428 (2023).
19. М. С. Шустин, Д. М. Дзедзисашвили, В. А. Степаненко, ФТТ **65**, 1021 (2023).
20. D. Sen and R. Chitra, Phys. Rev. B **51**, 1922 (1995).
21. O.I. Motrunich, Phys. Rev. B **73**, 155115 (2006).
22. E.S. Andriyakhina and I.S. Burmistrov, Phys. Rev. B **103**, 174519 (2021).
23. E.S. Andriyakhina, S. Apostoloff, and I.S. Burmistrov, Pis'ma v ZhETF **116**, 801 (2022).
24. S.S. Apostoloff, E.S. Andriyakhina, P.A. Vorobyev, O.A. Tretiakov, and I.S. Burmistrov, Phys. Rev. B **107**, L220409 (2023).
25. S.S. Apostoloff, E.S. Andriyakhina, and I.S. Burmistrov, Phys. Rev. B **109**, 104406 (2024).
26. A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, and A.D. Fedoseev, J. Sup. Nov. Magn. **34**, 3053 (2021).
27. U. Gungordu and A.A. Kovalev, J. Appl. Phys. **132**, 041101 (2022).
28. G. Yang, P. Stano, J. Klinovaja, and D. Loss, Phys. Rev. B **93**, 224505 (2016).
29. S. Rex, I.V. Gornyi, and A.D. Mirlin, Phys. Rev. B **100**, 064504 (2019).
30. A.A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals*, North-Holland, Amsterdam (1988).
31. A.O. Leonov, T.L. Monchesky, N. Romming, A. Kubetzka, A.N. Bogdanov, and R. Wiesendanger, New. J. Phys **18**, 065003 (2016).
32. R.M. Menezes, J.F.S. Neto, C.C. de Souza Silva, and M.V. Milosevic, Phys. Rev. B **100**, 014431 (2019).
33. X. Wang, H. Yuan, and M.X. Wang, Commun. Phys. **1**, 1 (2018).
34. M. Beg, M. Lang, and H. Fangohr, IEEE Trans. Magn. **58**, 1 (2022).

Coulomb correlations and the electronic structure of bulk V_2Te_2O

S. L. Skornyakov,¹⁾ I. O. Trifonov, V. I. Anisimov

Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620108 Yekaterinburg, Russia

Submitted 28 August 2024

Resubmitted 30 August 2024

Accepted 1 September 2024

The effect of Coulomb correlations on the electronic structure of bulk van der Waals material V_2Te_2O is studied by the charge self-consistent density functional theory and dynamical mean-field theory method. Our results show a significant correlation-induced renormalization of the spectral functions in the vicinity of the Fermi energy which is not accompanied by a transfer of the spectral weight to Hubbard bands. The computed quasiparticle effective mass enhancement m^*/m for the V $3d$ states varies from 1.31 to 3.32 indicating an orbital-dependent nature of correlation effects and suggests an orbital-selective formation of local moments in the V $3d$ shell. We demonstrate that taking into account of Coulomb interaction between the V $3d$ electrons yields the electronic specific heat coefficient $\gamma = 26.94 \text{ mJ K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$ in reasonable agreement with the experiment. We show that the strength of Coulomb correlations is sufficient to trigger a band shift along the $Z - \Gamma - X$ path of the Brillouin zone leading to a collapse of the electronic Fermi surface pocket centered on the $\Gamma - Z$ direction predicted by density functional theory.

DOI: 10.31857/S0370274X24100106, EDN: LJFFUX

Low-dimensional materials exhibiting a planar structural motif have always attracted a considerable amount of attention due to their exceptional physical properties [1]. The discovery of graphene and pnictide (chalcogenide) iron-based unconventional superconductors have stimulated an intense search of new (quasi) two-dimensional systems [2, 3]. Transition metal dichalcogenides are historically one of the most studied compounds of the class. From the 1960s these materials have been subject of ongoing research on superconductivity, spin- and charge-density waves [4–8].

Recently, a new family of two-dimensional van der Waals materials (TDWM) V_2Ch_2O ($Ch = \text{Se, Te}$) has been synthesized from their Cs and Rb precursors [9, 10]. In contrast to known metallic TDWM the electronic properties of V_2Se_2O and V_2Te_2O as well as the potential precursor of S-based TDWM CsV_2S_2O bear the fingerprints of strong electronic correlations [9–13]. In particular, the electronic specific heat coefficient of metallic V_2Te_2O is $33.9 \text{ mJ K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$, almost four times of that obtained by density functional theory (DFT) calculations indicative of strong renormalization of the electron mass [9]. Concurrently, the isostructural isoelectronic system V_2Se_2O is a paramagnetic (PM) semiconductor and has large local magnetic moments. In addition, the resistivity of V_2Se_2O exhibits an anomalous $\log(1/T)$ behavior reminiscent of that in underdoped cuprates [10].

In this Letter, we employ a combination of DFT with dynamical mean-field theory (DMFT) referred to DFT + DMFT to study the importance of Coulomb correlation effects in bulk PM V_2Te_2O [14, 15]. To this end, we compute and compare the DFT and DFT + DMFT Fermi surface, momentum-integrated and momentum-resolved spectral functions of V_2Te_2O . To quantify the strength of correlation effects we analyze the enhancement of quasiparticle mass and the local spin susceptibility of the V $3d$ states. In addition, we compute the electronic specific heat coefficient by DFT and DFT + DMFT and compare its value to the experiment.

Our results for the spectral properties show that the total spectral function in the vicinity of the Fermi energy (E_F) is dominated by the V $3d$ states. The shape of the V $3d$ orbitally-resolved spectral functions $A_\alpha(\omega)$ ($\alpha = 3z^2 - r^2, xz, yz, xy, x^2 - y^2$) computed by DFT + DMFT is similar to that obtained by DFT except a narrow region close to E_F . Specifically, we observe a strong renormalization of $A_\alpha(\omega)$ for the yz and $3z^2 - r^2$ orbitals in the vicinity of E_F while the shape of those of the xz , xy , and $x^2 - y^2$ states is less sensitive to correlation effects implying their orbital-selective nature. The overall transformation of the V $3d$ spectral function resembles that of the Fe $3d$ states in parent compounds of iron-based superconductors (FeSC) structurally related to oxychalcogenide TDWM [16, 17].

Next, we compute the orbitally-resolved quasiparticle mass enhancement m^*/m . Our results show that

¹⁾e-mail: skornyakov@imp.uran.ru

the largest m^*/m of 3.32 and 2.72 occurs in the $x^2 - y^2$ and xz states, respectively. The other V 3d states exhibit significantly smaller m^*/m ranging from ~ 1.3 ($3z^2 - r^2$ and yz) to 1.94 (xy). These values are by a factor of about 1.5 larger than those obtained by DFT+DMFT for moderately correlated parent compounds of FeSC [17–19].

The computed mass enhancement suggests a strongly correlated metallic ground state of V_2Te_2O in line with a large value of the Sommerfeld specific heat coefficient $\gamma_{\text{exp}} = 33.9 \text{ mJ K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$ obtained in the experiment (as compared to that derived from DFT) [9]. Our DFT calculations yield the electronic specific heat coefficient $\gamma_{\text{DFT}} = 9.67 \text{ mJ K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$, which is 3.5 times smaller the experimental estimate, in reasonable agreement with the result reported by Ablimit and coauthors [9]. By contrast, our DFT+DMFT calculations give $\gamma_{\text{DMFT}} = 26.94 \text{ mJ K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$, evaluated using the Fermi-liquid formula, $\gamma_{\text{DMFT}} = \frac{1}{3}\pi^2 k_B^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha}(\omega = 0)(m^*/m)_{\alpha}$ reducing the deviation between theory and experiment to 20 % [20].

Our DFT+DMFT results for the momentum-resolved spectral function $A(\mathbf{k}, \omega)$ (Fig. 1, bottom) show a coherent distribution of the spectral weight close to E_F corresponding to a well-defined Fermi surface (Fig. 1, top). We observe that the effect of electronic correlations on the band structure can be described by a scaling transformation of the energy bands obtained by DFT almost for the entire Brillouin zone in close similarity to parent compounds of FeSC [17, 21, 22]. We note however that unlike FeSC the shift of the bands for specific paths of the reciprocal space in V_2Te_2O is sufficient to induce a collapse of the electronic-like quasi two-dimensional pocket centered at the $\Gamma - Z$ direction.

Finally, we analyze the local spin susceptibility $\chi_{\alpha}(\tau) = \langle \hat{s}_{\alpha}^z(\tau) \hat{s}_{\alpha}^z(0) \rangle$. On the imaginary time interval $\tau \in (0, \beta/2)$ ($\beta = 1/k_B T$) the computed $\chi_{\alpha}(\tau)$ exhibits a sharp decrease followed by an extended flat region close to zero for the $3z^2 - r^2$, xy , and yz states. By contrast, the imaginary time evolution of $\chi_{\alpha}(\tau)$ for the xz and $x^2 - y^2$ states is less pronounced. This behavior is indicative of localized spin moments in the xz and $x^2 - y^2$ states and more itinerant nature of the $3z^2 - r^2$, xy , and yz states.

Funding. The density functional theory (DFT) band structure calculations were carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Electron” # 122021000039-4). The calculations of the spectral and magnetic properties by the combined method of density functional theory and dynamical mean-field theory

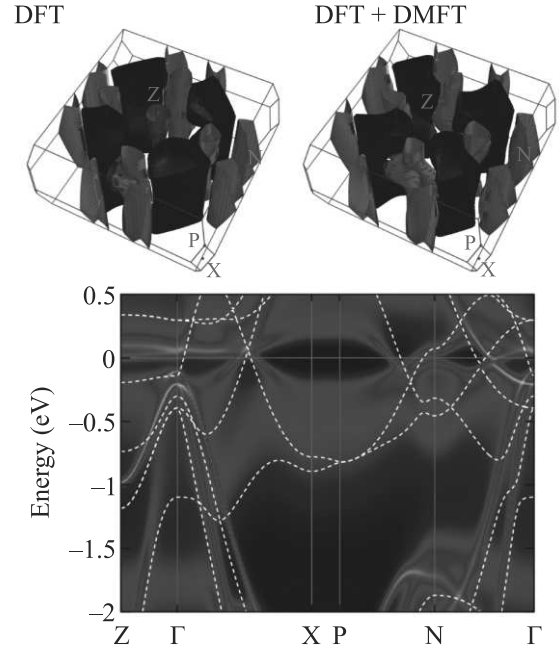


Fig. 1. (Color online) Top: Fermi surface of V_2Te_2O as computed by non-magnetic DFT (left) and paramagnetic DFT+DMFT (right) at $T = 290 \text{ K}$. Bottom: spectral function $A(\mathbf{k}, \omega)$ of paramagnetic V_2Te_2O computed by DFT+DMFT at $T = 290 \text{ K}$ (contours) in comparison with the band structure calculated by non-magnetic DFT (dashed lines)

(DFT+DMFT) were supported by the Russian Science Foundation (Project 24-12-00024).

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

1. S. Z. Butler, S. M. Hollen, L. Cao et al. (Collaboration), ACS Nano **7**, 2898 (2013).
2. K. S. Novoselov, V. I. Falko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, and K. Kim, Nature **490**, 192 (2012).
3. R. M. Fernandes, A. I. Coldea, H. Ding, I. R. Fisher, P. J. Hirschfeld, and G. Kotliar, Nature **601**, 35 (2022).
4. J. A. Wilson and A. D. Yoffe, Adv. Phys. **18**, 193 (1969).
5. T. F. Smith, R. N. Shelton, and R. E. Schwall, J. Phys. F: Met. Phys. **5**, 1713 (1975).
6. C. B. Scruby, P. M. Williams, and G. S. Parry, Philos. Mag. **31**, 255 (1975).
7. I. Guillaumon, H. Suderow, S. Vieira, L. Cario, P. Diener, and P. Rodière, Phys. Rev. Lett. **101**, 166407 (2008).
8. S. Koley, N. Mohanta, and A. Taraphder, Eur. Phys. J. B **93**, 77 (2020).
9. A. Ablimit, Y.-L. Sun, E.-J. Cheng, Ya-B. Liu, S.-Q. Wu, H. Jiang, Z. Ren, S. Li, and G.-H. Cao, Inorg. Chem. **57**, 14617 (2018).
10. H. Lin, J. Si, X. Zhu, K. Cai, H. Li, L. Kong, X. Yu, and H.-H. Wen, Phys. Rev. B **98**, 075132 (2018).

11. S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, *Nat. Rev. Mater.* **2**, 17033 (2017).
12. G. H. Han, D. L. Duong, D. H. Keum, S. J. Yun, and Y. H. Lee, *Chem. Rev.* **118**, 6297 (2018).
13. M. Valldor, P. Merz, Y. Prots, and W. Schnelle, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 23 (2016).
14. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
15. H. Park, A. J. Millis, and C. A. Marianetti, *Phys. Rev. B* **90**, 235103 (2014).
16. M. V. Sadovskii, *Phys.-Uspekhi* **51**, 1201 (2008).
17. M. Aichhorn, L. Pourovskii, V. Vildosola, M. Ferrero, O. Parcollet, T. Miyake, A. Georges, and S. Biermann, *Phys. Rev. B* **80**, 085101 (2009).
18. S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **86**, 125124 (2012).
19. S. L. Skornyakov and I. Leonov, *Phys. Rev. B* **100**, 235123 (2019).
20. L. V. Pourovskii, G. Kotliar, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **75**, 235107 (2007).
21. S. L. Skornyakov, N. A. Skorikov, A. V. Lukoyanov, A. O. Shorikov, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **81**, 174522 (2010).
22. S. L. Skornyakov, D. Y. Novoselov, T. Gürel, and V. I. Anisimov, *JETP Lett.* **96**, 118 (2012).

Синхронное детектирование нелинейных явлений в оптоакустических осцилляциях нанопленки, инициированных фемтосекундным лазерным импульсом

В. А. Хохлов⁺, С. А. Ромашевский*, С. И. Ашитков*, Н. А. Иногамов^{+*×1)}

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

*Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

[×]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова Росатом, 127055 Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 июля 2024 г.

После переработки 27 августа 2024 г.

Принята к публикации 28 августа 2024 г.

Для развития микроэлектроники существенное значение имеют исследования физики индуцированных лазером сверхбыстрых процессов в тонких пленках. К таким процессам относятся: нагрев электронной подсистемы, релаксация и транспорт поглощенной энергии, а также генерация и распространение пикосекундных акустических волн. В этой связи в работе изучена динамика изменения дифференциального коэффициента отражения $\Delta R(t)/R_0$ пленки никеля (Ni) толщиной 73 нм на подложке из стекла. Измерения выполнены в схеме “возбуждение–зондирование” (pump-probe) с синхронным детектированием сигнала $\Delta R(t)/R_0$. За счет увеличения периода следования t_{cool} последовательности нагревающих (возбуждающих) импульсов достигнуты высокие значения поглощенного флюенса до 11 мДж/см². Увеличение t_{cool} позволяет лучше охлаждать пленку после нагревающего воздействия. В результате получены рекордные значения температур ($T_e \approx 3$, $T_i \approx 1$ кК) и напряжений (до 7 ГПа). В литературе отсутствуют данные при таких высоких температурах и давлениях. Именно при этих повышенных значениях удастся заметить влияние нелинейных эффектов – впервые в опытах с синхронным детектированием.

DOI: 10.31857/S0370274X24100115, EDN: QFZKSG

1. Введение. Бесконтактные, неразрушающие оптические методы анализа тепловых и механических свойств с наномасштабным пространственным, а также фемто- и пикосекундным временным разрешением, необходимы для оптимизации характеристик тонких пленок на подложках. Такого рода материалы являются основой современной солнечной энергетики (фотовольтаика) и электронной промышленности (гетероструктуры, топологические изоляторы и устройства на их основе). Реализация подобных прецизионных измерений требует применения фемтосекундных лазеров и методов синхронного детектирования [1–6].

Важным аспектом сверхбыстрого нагрева материала с помощью фемтосекундных лазерных импульсов является генерация пикосекундных акустических импульсов (или когерентных акустических фононов) в гигагерцовом–терагерцовом частотном диапазоне [7, 8]. С помощью лазерно-индуцированных акустических импульсов возможно,

например, обнаружить наличие скрытых интерфейсов и структур через оптически непрозрачные материалы (металлы) с микронным латеральным и наномасштабным разрешением по глубине [9, 10]. Для исследования оптически прозрачных сред с помощью акустических импульсов используют методику бриллюэновского рассеяния во временной области [11, 12], которая позволяет получить информацию об акустооптических свойствах исследуемого материала, наличии структурных неоднородностей с наноразмерным пространственным разрешением [13, 14].

Методика синхронного детектирования (СД) позволяет обнаружить искомый сигнал малой амплитуды на определенной частоте среди широкополосного шумового фона высокой амплитуды. Согласно данной методике определяется вариация во времени дифференциального коэффициента отражения $\Delta R(t)/R_0$ или пропускания $\Delta T(t)/T_0$ зондирующего лазерного импульса. Изменения коэффициентов R, T связаны с внутренними переходными процессами в облученной мишени, которые индуцируют

¹⁾e-mail: nailinogamov@gmail.com

ся воздействием нагревающего импульса. Описание происходящего внутри мишени на базе методики СД по смыслу аналогично применению методики VISAR (Velocity interferometer system for any reflector) [15–17], но на совсем других пространственно-временных масштабах – пикосекунды вместо нано- и микросекунд. СД позволяет анализировать пикосекундную акустику.

Существенное значение данной работы состоит в том, что удалось применить высокоточную методику СД при повышенных значениях поглощенного мишенью флюенса F_{abs} . Т.е. продвинуться значительно дальше по диапазону температур и давлений в сторону их повышения по сравнению с современными литературными данными по данной широко применяемой методике. Слабый нагрев с помощью фемтосекундных лазерных импульсов и релаксация энергии в тонких пленках никеля изучались с помощью СД с целью выяснения динамики сверхбыстрого размагничивания [18]. См. также работы [6, 19], относящиеся к опто-магнито-акустике и магнетоплазмонике. По методике СД экспериментальные исследования фундаментальных законов взаимодействия электронной и фононной подсистем, а также экспериментальные исследования переноса тепла на наномасштабах [3, 20, 21] проводились лишь при малых перегревах электронной подсистемы.

Исследования динамики оптического отклика при высоких значениях F_{abs} с помощью СД ранее проводили в работах [22, 23]. Это достигалось за счет удлинения промежутка времени t_{cool} между нагревающими лазерными импульсами, чтобы после нагрева мишень успела вернуться в состояние при комнатной температуре. Но в работах [22–24] усилия были сосредоточены на другом. Определялись параметр взаимодействия электронной и фононной подсистем α и теплопроводность κ в золоте в двухтемпературных (2Т) условиях.

В настоящей работе рассматриваются оптоакустические явления при повышенных флюенсах F_{abs} . Золото, изученное в статьях [23, 24], плохо подходит для анализа оптоакустики. Дело тут в следующем. В золоте мал коэффициент α и велика температуропроводность $\chi_{2T} = \kappa_{2T}/c_e$ в 2Т условиях [25]; здесь c_e – теплоемкость электронной подсистемы. В металлах 2Т значения χ_{2T} могут на два порядка превосходить однотемпературные (1Т, $T_e \approx T_i$) значения $\chi_{1T} = \kappa_{1T}/c \sim 0.2 - 1 \text{ см}^2/\text{с}$ [25], c – это 1Т теплоемкость. Для кристаллов с одним атомом на ячейку решетки $c \approx 3nk_B$ – закон Дюлонга–Пти. Электроны сильно вырождены, их вклад в теплоемкость мал по сравнению с $3nk_B$ при относительно невысоких элек-

тронных температурах T_e вплоть до значений $\sim 1 \text{ эВ}$ при энергии Ферми металлов $\sim 10 \text{ эВ}$. Простые пояснения этих обстоятельств описаны в статье [25]. Соответственно в золоте весьма продолжительна 2Т стадия (ее длительность t_{eq}) и очень велика глубина прогрева $d_T \approx 2\sqrt{\chi_{2T}t_{eq}} \sim 150-200 \text{ нм}$ на 2Т стадии. В течение 2Т стадии тепловая волна уходит из скин-слоя со сверхзвуковой скоростью. Акустическая стадия следует после окончания 2Т стадии и, соответственно, после прекращения сверхзвукового распространения тепла.

В данной работе мы исследовали нанопленку никеля на стеклянной подложке. Пленка ограничена границей с воздухом с одной стороны (это фронтальная граница) и контактом никель–стекло с другой стороны. В никеле параметр α велик по сравнению с золотом, длительность 2Т стадии t_{eq} мала, коэффициент χ_{2T} и глубина прогрева d_T меньше, чем в золоте. Акустическая стадия начинается резче и раньше, чем в золоте. Поэтому наблюдается отчетливо с помощью методики СД [26]. Толщина слоя прогрева d_T в никеле несколько превышает толщину скин-слоя $\delta_{sk} = 13$ и 12 нм для первой 793 нм и второй 396 нм гармоник соответственно [27].

Как известно, после окончания сверхзвуковой 2Т стадии (квазигомогенного распространения поглощенной энергии вглубь по электронной подсистеме при практически неподвижном веществе) происходит распад профиля давления на две волны по Далламбуру. Одна из этих волн (волна сжатия) сразу бежит в толщу пленки. Другая отражается от фронтальной границы (механически это свободная граница), меняет знак амплитуды и распространяется вслед за первой волной в виде волны разрежения. В результате в пленку бежит комбинация волны сжатия и разрежения, названная зет-профилем [28, 29] или зигзаг волной за свою форму. В линейной акустической аппроксимации между волнами сжатия и разрежения имеется резкий скачок. Как будет видно из экспериментальных и численных результатов, представленных ниже, в силу нелинейных эффектов происходит постепенное уменьшение крутизны скачка. В линейном случае эта крутизна всегда бесконечна.

2. Эксперимент. В качестве лазерного источника использовалась фемтосекундная лазерная система субтераваттного диапазона с регенеративным усилением чирпированных импульсов на кристалле титан-сапфира (Coherent, Legend). Система генерирует импульсы длительностью 60 фс на длине волны 793 нм с частотой повторения 1 кГц . В качестве образца использовалась поликристаллическая

пленка никеля (Ni) толщиной $d_f = 73 \pm 2$ нм. Толщина измерена с помощью атомно-силового микроскопа Veeco Multimode 5. Шероховатость поверхности пленки (Ra) составляла 6 нм. Пленка нанесена на стеклянную боросиликатную подложку толщиной 150 мкм методом магнетронного распыления в аргонной среде при давлении 5×10^{-2} Торр.

Измерения временной динамики дифференциального коэффициента отражения

$$\Delta R(t)/R_0, \quad (1)$$

наведенного в исследуемом образце *нагревающим* импульсом, регистрировались с помощью *зондирующего* импульса в схеме “возбуждение–зондирование” с применением методики СД [26, 30]. Здесь $\Delta R(t) = R(t) - R_0$, $R(t)$ и R_0 – индуцированный и исходный коэффициенты отражения.

Нагревающий импульс после преобразования во вторую гармонику в кристалле ВВО имел длительность $t_{\text{pump}} = 150$ фс и длину волны $\lambda_{\text{pump}} = 396$ нм. Нагревающий импульс фокусировался с помощью 200-мм линзы под углом падения 45° в эллиптическое пятно с размерами $d_x = 130$ и $d_y = 93$ мкм по уровню $1/e$. Изменения коэффициента (1) регистрировались в центре области нагрева с помощью зондирующих импульсов. Зондирующий импульс имел длительность $t_{\text{probe}} = 60$ фс и длину волны $\lambda_{\text{probe}} = 793$ нм. Этот импульс фокусировался с помощью микрообъектива 4X/0.10 по нормали к поверхности в пятно диаметром $d_x = d_y = 15$ мкм по уровню $1/e$.

Для изменения временной задержки t_{delay} между нагревающим и зондирующим импульсами использовалась оптическая линия задержки. Времена t_{delay} находятся в диапазоне от -3 до 300 пс. Дискретный шаг по времени t_{delay} менялся от 30 фс на ранней стадии до 400 фс на более поздних стадиях.

Малые изменения коэффициента отражения (1) с амплитудами $\sim 10^{-4}$ – 10^{-2} величины регистрировались с использованием методики СД. Методика позволяет с помощью синхронного усилителя [26] измерять слабые периодические полезные сигналы на определенной (заданной) частоте на фоне шумов.

Сигналы зондирующего импульса, отраженного от образца и падающего на образец, регистрируются с помощью двух фотодиодов в балансном режиме и направляются на дифференциальный вход синхронного усилителя (SR830). В нашем варианте методики СД измеряется сигнал (1) на частоте следования нагревающих импульсов 500 Гц (после механического прерывателя), при этом частота следования зондирующих импульсов 1 кГц.

Процесс измерений был автоматизирован с применением программного обеспечения. Минимальные регистрируемые изменения сигнала (1) в примененной схеме составляли $\sim 5 \times 10^{-5}$.

Нагревание и измерения коэффициентов отражения зондирующего (1) и нагревающего R_{pump} импульсов осуществлялись с фронтальной поверхности пленки никеля. С учетом измеренного нами значения $R_{\text{pump}} = 0.14$ поглощенный флюенс F_{abs} нагревающего импульса варьировался в пределах от 0.906 до 10.87 мДж/см². Очень важно то, что это максимально возможный флюенс на частоте следования нагревающих импульсов 500 Гц. При этом все изменения в образце были обратимыми. Методики измерений (а) флуенса, падающего на мишень нагревающего импульса, (б) коэффициента отражения нагревающего импульса и (с) размера пятна фокусировки описаны в работе [24].

При более высоких значениях F_{abs} теряется обратимость и происходит разрушение образца. Причем на сегодня не ясно, какой процесс из следующих двух доминирует при разрушении. С одной стороны, достаточно велики механические нагрузки на первых десятках пикосекунд (см. также [31]): силовые напряжения до 7 ГПа в пленке и ~ 1 ГПа в стекле для $F_{\text{abs}} = 10.87$ мДж/см². С другой стороны, в длинных сериях нагревающих импульсов происходит накопление температуры.

3. Постепенный нагрев при многократных повторениях. На промежутке времени $t_{\text{cool}} = 2$ мс между последовательными нагревающими импульсами пленка остывает за счет теплоотвода. Оценка радиуса r растекания тепла в стороны по пленке за время между нагревающими импульсами дает $r \sim 2\sqrt{\chi_{1T} t_{\text{cool}}} = 440$ мкм; $\chi_{1T} \approx 0.2$ см²/с. Отношение площадей нагрева и растекания около 20. Приращение температуры пленки в центре пятна нагрева после электрон-фононной релаксации и прогрева пленки по толщине составляет величину

$$\Delta T(F_{\text{abs}} = 10.87 \text{ мДж/см}^2) = 350 \text{ К} \quad (2)$$

на временах $t \sim 100$ пс. Это данные численного моделирования.

За время t_{cool} под пятном нагрева пленки прогревается слой стекла d_{glass} толщиной более 60 мкм; $\chi_{\text{glass}} \approx 5 \cdot 10^{-3}$ см²/с. Толщина d_{glass} на три порядка больше толщины пленки d_f . Теплоемкости никеля и стекла суть $3.8 \cdot 10^6$ и $2.1 \cdot 10^6$ Дж/К/м³. За счет прогрева стекла за время t_{cool} приращение температуры пленки снижается в 500 раз. Видим, что по сравнению с растеканием тепла по пленке прогрев стекла сильнее сказывается на охлаждении пленки. Сниже-

ние температуры определяется безразмерным отношением исходного и конечного (на момент t_{cool}) объемов $20 \times 500 = 10^4$ – это произведение площади растекания тепла по пленке на глубину проникновения в подложку. В этих объемах сосредоточена диффундирующая в пространстве тепловая энергия. Причем по форме этот объем вытянут по площади – размер пятна прогрева по пленке 440 мкм, при этом глубина прогрева стекла 60 мкм, т.е. меньше в 7 раз.

Получается, что за время t_{cool} перед самым началом очередного импульса нагрева приращение температуры пленки снизится от значения (2) до значения

$$T^* = \Delta T(F_{\text{abs}} = 10.87 \text{ мДж/см}^2)/10^4 = 0.04 \text{ К}. \quad (3)$$

В эксперименте выполнялось три скана подряд, т.е. конец одного скана отделен от начала следующего скана тем же промежутком времени t_{cool} . Внутри каждого из этих сканов измерения проводились для всех требуемых значений t_{delay} . На каждое значение t_{delay} уходило примерно 175 нагревающих импульсов. В каждом скане выполнялись измерения для примерно 1100 значений t_{delay} . Серия нагревающих воздействий в трех сканах состояла из $N \approx 6 \cdot 10^5$ воздействий. По времени это занимало около 20 минут.

Оценка роста температуры ΔT_{fin} мишени за N нагревающих импульсов имеет вид

$$\Delta T_{\text{fin}} = \sqrt{N} T^*. \quad (4)$$

Такая оценка для указанного значения числа N дает приращение (4), равное 30 К. Оценка (4) с величиной T^* (3) выполнена в предположении бесконечного размера пленки и бесконечно толстого слоя стекла. Оценка основана на линейности уравнения теплопроводности, росте глубины прогрева $\propto \sqrt{t}$ и суммировании вкладов от последовательности нагревающих импульсов $\sum_{n=1}^N T^*/\sqrt{n}$.

Реальная оценка должна учитывать размеры и конфигурацию мишени. Дело в том, что тепло первых нагревающих импульсов растекается на значительные расстояния от пятна фокусировки, поскольку длительность опыта велика. Например, радиус распространения тепла по пленке за 20 мин составит 30 см. При $N = 6 \cdot 10^5$ и поглощенной энергии 1.2 мкДж за один нагревающий импульс, общая энергия, переданная в образец, составит 0.7 Дж. Пусть площадь пленки и подложки 1 см^2 . Образец теплоизолирован. Тогда нагрев образца за три скана составит 20 К при однородном распределении температуры. Таким образом, значение (4) можно снижать за счет повышения эффективности теплоотвода от образца.

На рисунке 1 штриховая горизонтальная прямая отмечает исходный уровень коэффициента (1) нашей мишени из пленки и подложки. Для толстого образца никеля при нормальном падении на длине волны 793 нм имеем $R_0 = 0.74$. На короткой 2Т стадии I на рис. 1 отражение образца увеличивается. Этой стадии соответствуют положительные значения поправки (1). Увеличение коэффициента R обусловлено перераспределением электронов между s - и d -зонами никеля $3d^8 4s^2$ или $3d^9 4s^1$ [32]. Большой центробежный потенциал $3d$ -зоны поднимает $3d$ -электроны на уровень 4-й оболочки. Повышение коэффициента отражения на 2Т стадии достаточно типично для металлов и длины волны λ , на которой коэффициент отражения низкий. Для хорошо отражающих металлов на 2Т стадии отражение ухудшается [24].

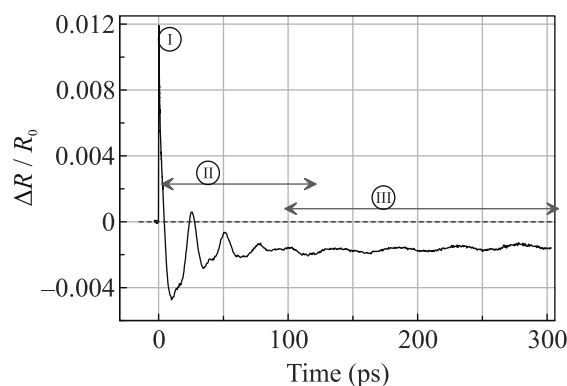


Рис. 1. (Цветной онлайн) Временная вариация коэффициента (1) при максимальном значении $F_{\text{abs}} = 10.87 \text{ мДж/см}^2$ на частоте 500 Гц. Имеются три характерные стадии: I – 2Т стадия продолжительностью ~ 1 пс; II – стадия доминирования акустического эха в пленке никеля; III – бриллюэновское рассеяние зондирующих импульсов на акустической волне, распространяющейся в стеклянной подложке

На 1Т стадиях II и III, показанных на рис. 1, коэффициент (1) в основном отрицательный из-за нагрева пленки, снижения ее плотности и, соответственно, плазменной частоты. В данной работе ограничимся анализом акустических явлений на стадии II.

4. Нелинейная лазерная гидродинамика.

Характер сильных нелинейных явлений стал ясен уже начиная с первых работ, описывающих взаимодействие ультракоротких импульсов с металлами [33, 34]. Это, во-первых, образование ударных волн [35, 36], во-вторых, отслоение пленок (деламинация) [37, 38], реверберация в нагретом слое [39] и, в-третьих, разрыв конденсированной фазы (наноток, кавитация) [29, 33, 39–43] вследствие сильно-

го растяжения. В работах [39, 41, 42] пикосекундные реверберации наблюдались в твердой фазе при отколе или в расплаве при фемтосекундной лазерной абляции.

Нанооткол разрушает мишень после однократного воздействия. Поэтому при применении методики синхронного детектирования (многократные воздействия) оперируют при гораздо более слабой энергетике нагревающих импульсов. При этом описание акустического поля ограничивают линейным приближением [1–4, 6].

Формирование течения в виде “зет-волны” после сверхзвукового нагрева металла электронной тепловой волной изучено [28, 29]. Как сказано, зет-профиль ABCD на рис. 2 появляется в результате (а) “мгновенного” (сверхзвук) образования слоя/профиля давления толщиной d_T в неподвижном $u = 0$ (это важно) веществе, (б) распада созданного сверхзвуком профиля давления по Даламберу при $p > 0, u = 0$ и (с) отражения от границы с воздухом.

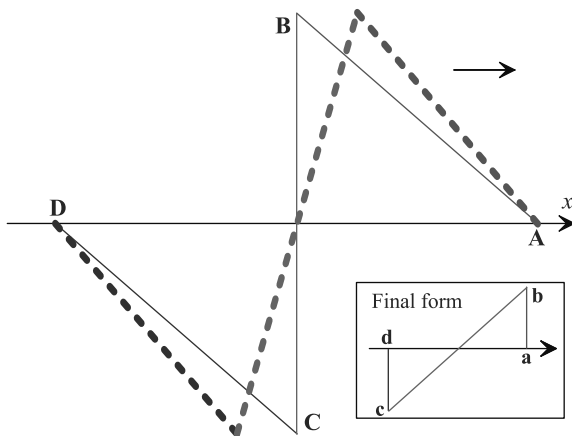


Рис. 2. (Цветной онлайн) Мгновенный профиль давления в акустической волне ABCD, сформированной фемтосекундным воздействием. Волна распространяется в направлении стрелки направо. Облученная фронтальная граница воздух/никель остается слева. В линейном приближении форма ABCD с вертикальным скачком BC остается неизменной. Искаженный за счет нелинейности профиль показан точками. Наклон скачка BC постепенно снижается. Асимптотически волна принимает вид abcd, показанный в прямоугольной вставке. Асимптотический профиль состоит из двух ударных волн ab и cd, и семейства характеристик bc

Зигзаг или зет-профиль ABCD на рис. 2 состоит из волны сжатия АВ (красный отрезок) $p > 0$, бегущей впереди, и примыкающей к ней волны растяжения CD (синий отрезок) $p < 0$. Резкий скачок BC

между этими двумя составляющими (зеленый отрезок) связан с условием отражения на фронтальной границе. Смена знака давления, а значит и скорости $u = p/z$, обусловлена законом сохранения импульса; здесь z – акустический импеданс никеля. Импульсом поглощенных и отраженных фотонов можно пренебречь в отношении скоростей гидродинамического движения и скорости света. Треугольная форма на схеме на рис. 2 выбрана для простоты. Реальная форма складывается на 2Т стадии. Она ближе к Гауссиану – решению уравнения теплопроводности.

В нелинейном случае форма ABCD на рис. 2 с течением времени меняется. В точках А и D волна распространяется со скоростью звука c_0 , поскольку (а) вещество неподвижно и (б) давление в этих точках равно нулю. Однако на гребне (точка В) и впадине (точка С) волны ситуация другая. При учете нелинейности в первом порядке теории возмущений скорость гребня В на величину $\Delta v = (1/z + \partial c/\partial p)p$ больше, чем невозмущенная скорость c_0 . Таким образом, точки В и С расходятся с течением времени со скоростью $2\Delta v$.

Первый признак нелинейности – это изменение наклона семейства характеристик ВС, см. рис. 2. Нелинейная стадия 1 заканчивается опрокидыванием волн – синий и красный наклонные отрезки на рис. 2 трансформируются в ударные скачки ab и cd на прямоугольной вставке на рис. 2. На нелинейной стадии 2 амплитуда скачков ab и cd снижается пропорционально $1/\sqrt{t}$, см. [44]. Это происходит за счет поглощения характеристик семейства bc в ударных волнах ab и cd. Мгновенная амплитуда скачка определяется давлением p на характеристике, входящей в этот момент в скачок. В скачок входят характеристики со все меньшими и меньшими значениями p . Соответственно амплитуда скачка снижается. Наши опыты при наивысших для техники синхронного детектирования флюенсах F_{abs} и численные расчеты впервые для указанной техники обнаруживают развитие оптоакустических процессов на нелинейной стадии 1.

5. Численное моделирование и сравнение с опытами. Как и в методе VISAR [15, 17], измерения коэффициента (1) [1] связаны с сигналом от границы мишени, внутри которой протекают переходные процессы. Проведем анализ процессов внутри мишени с помощью 2Т гидродинамического моделирования (2Т-гд код [45]) в приближении изотропного упругого тела. На рисунке 3 более подробно представлена стадия II с рис. 1. Вертикалями $t = \text{const}$ отмечены моменты времени, в которые мы смотрим на происходящее в толще мишени. Синие вертикали относят-

ся к рис. 4. Рисунок 4 поясняет структуру акустического поля внутри пленки никеля. Красные вертикали связаны с рис. 5. Они требуются для того, чтобы понимать физику формирования акустического всплеска. Длина красной горизонтальной черточке над первым всплеском соответствует времени циркуляции характеристик ВС через скин-слой, см. рис. 5. Зеленые метки на рис. 3 относятся к волне разрежения RW (rarefaction wave).

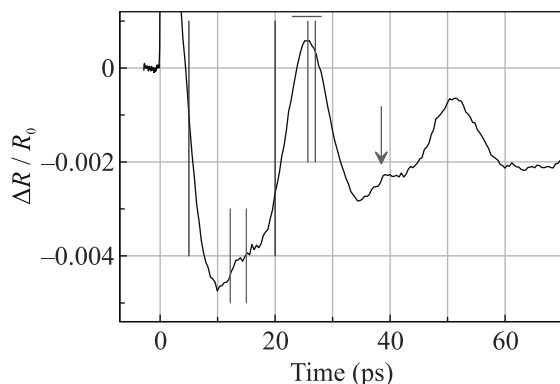


Рис. 3. (Цветной онлайн) Показаны два первых акустических пика зависимости (1) с рис. 1. Зелеными двумя вертикалями отмечен 1-й приход волны разрежения RW на фронтальную границу fr, см. рис. 6. Зеленая стрелка отмечает 2-й приход волны RW на границу fr. См. текст

Нагревающий импульс порождает в мишени акустическую волну вида, показанного на рис. 2. Но на рис. 2 z -профиль распространяется в неограниченном объеме. В нашей ситуации с достаточно тонкой пленкой 73 нм, сопоставимой по толщине со слоем “мгновенного” 2Т прогрева d_T , необходимо учитывать наличие контакта никель-стекло.

Толщина прогрева d_T в никеле на используемой для нагрева длине волны 396 нм и при поглощенном флюенсе 10.87 мДж/см² составляет примерно 30 нм. При $F_{abs} = 0.906$ мДж/см² величина $d_T \approx 20$ нм. Толщина d_T определена посредством 2Т гидродинамического численного моделирования по полувысоте приращения мгновенного профиля электронной температуры $T_e(x, t^*)$ по сравнению с комнатным значением температуры в момент t^* достижения максимального значения температуры T_e на фронтальной (т.е. облучаемой) поверхности.

Сверхзвуковая электронная тепловая волна быстро (мгновенно для акустических масштабов времени) поднимает давление на контакте со стороны никеля. Акустический импеданс стекла в разы меньше импеданса никеля. Поэтому “мгновенно” от контакта начинается распространяться в толщу пленки нике-

ля волна разрежения RW – это следствие быстрого “включения” давления в никеле на контакте.

Таким образом, в пленке распространяются две особенности звукового поля – см. рис. 4. Это, во-первых, скачок ВС (см. рис. 2, 4) и, во-вторых, волна разрежения RW, идущая от контакта, см. рис. 4. На акустических масштабах времени они стартуют в нулевой момент времени внутрь пленки одна от фронтальной границы, а другая, как сказано, от контакта – т.е. навстречу друг другу. Всплески на зависимости (1) на рис. 1 и 3 связаны с приходом этих особенностей в скин-слой для зондирующих импульсов; и нагревающий, и зондирующий импульсы освещают пленку с фронтальной стороны; скин прилегает к фронтальной границе. Приход этих особенностей обуславливает быстрое изменение плотности и, следовательно, плазменной частоты ω_p . Повышение плотности никеля в скин-слое увеличивает коэффициент отражения (1).

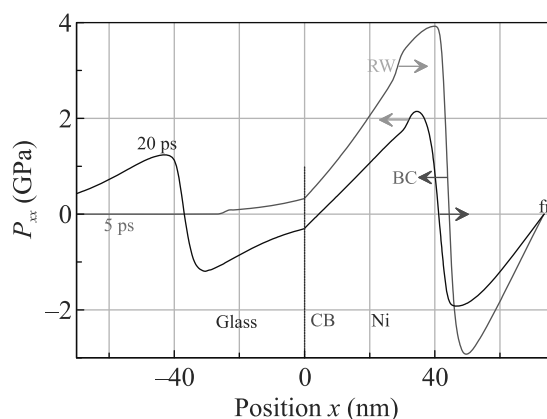


Рис. 4. (Цветной онлайн) Акустическое поле, получающееся сложением волны ABCD (см. рис. 2) и волны разрежения RW. Отмечены особенность ВС волны ABCD (малиновые стрелки) и волна RW (голубые стрелки). Показаны первый (красный профиль) и второй (черный профиль) полупериоды длительностью ≈ 13 пс каждый. На 1-м полупериоде особенности ВС и RW бегут от фронтальной границы (fr) и контакта (CB – contact boundary) соответственно. На 2-м полупериоде произошли первые отражения этих волн и направления распространения меняются на обратные. Смещения границ fr и CB менее 1 нм, и в приведенном масштабе незаметны. Крутизна волны RW определяется длительностью нарастания давления в никеле на контакте на 2Т стадии.

По рисунку 5 можно судить по размаху изменения плотности в скин-слое при отражении семейства характеристик ВС. Отметим, что хотя указанный размах изменения достаточно велик (1.4 %), из-

менение плотности на самой фронтальной границе мало, см. рис. 6. Гидродинамика применима на масштабах порядка нескольких межатомных слоев. У границы в этом пограничном слое выполняется динамическое граничное условие $p_{xx}|_{fr} = 0$. Этим условием обусловлена малость вариации $\rho|_{fr}$ на границе. Значения плотности никеля ниже его исходной плотности $\rho_0 = 8.907 \text{ г/см}^3$. Это обусловлено нагревом пленки. Поэтому относительное изменение плотности $(\rho - \rho_0)/\rho_0$ на рис. 5, 6 является отрицательным.

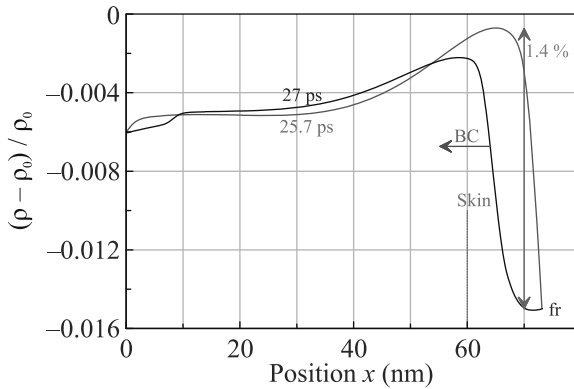


Рис. 5. (Цветной онлайн) Отражение семейства характеристик ВС волны ABCD (см. рис. 2 и рис. 4) от фронтальной границы fr. На черном профиле характеристики ВС уже отразились и двигаются налево. Прохождение участка ВС туда и обратно через скин-слой толщиной 13 нм занимает 5 пс. Этот отрезок времени показан на рис. 3 в виде горизонтальной красной черточки над 1-м акустическим всплеском (1-е эхо скачка ВС). Моменты времени 25.7 и 27 пс представлены на рис. 3 вертикальными красными прямыми. О толщине скина 13 нм можно судить по вертикальной прямой, показанной здесь короткими оранжевыми штрихами

6. Связь гидродинамики и коэффициента отражения. Представим диэлектрическую проницаемость никеля с помощью формулы Друде

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2(1 + \hat{\rho})}{\omega^2}, \quad \epsilon_2 = \frac{\omega_p^2(1 + \hat{\rho})}{\omega^2(\omega\tau(1 + \hat{\tau}))}. \quad (5)$$

Здесь $\omega = 2.4 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}$ – частота световых осцилляций на длине волны $\lambda = 793 \text{ нм}$. Безразмерные поправки по плотности и времени столкновений обозначены $\hat{\rho} = (\rho - \rho_0)/\rho_0$ и $\hat{\tau}$. Определим плазменную частоту $\omega_p = 10.6 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}$ и время свободного пробега $\tau = 0.39 \text{ фс}$ по диэлектрической постоянной никеля $\epsilon_1 = -18.8$, $\epsilon_2 = 21.45$. Значения ϵ взяты из справочника для $\lambda = 793 \text{ нм}$ при комнатных условиях. При этом поправки, определяющие отклонение от этих условий, равны нулю.

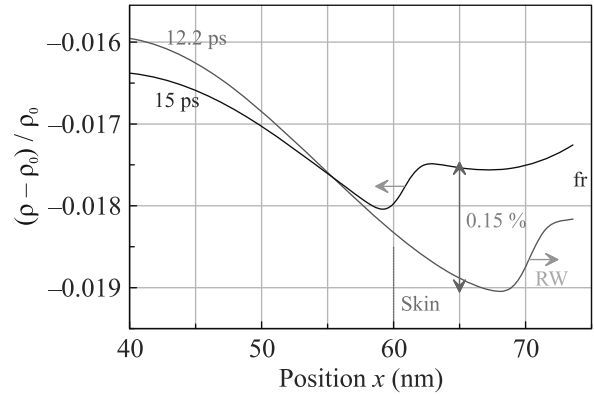


Рис. 6. (Цветной онлайн) Отражение волны разрежения RW (см. рис. 4) от фронтальной границы fr. На красном (черном профиле) волна движется направо к границе fr (налево от границы fr). Моменты времени 12.2 и 15 пс представлены на рис. 3 вертикальными зелеными прямыми. Скин-слой выделен надписью skin

Вычислим по функциям (5) коэффициент отражения $R(\hat{\rho}, \hat{\tau})$ с учетом поправок. Потом разложим вычисленную функцию R по малым поправкам $\ll 1$. В линейном приближении получим

$$R = 0.74 + 0.11\hat{\rho} + 0.064\hat{\tau}. \quad (6)$$

Как видим, увеличение плотности (а значит ω_p) и времени пробега увеличивают коэффициент R (6). Так и должно быть.

Возьмем поправку $\hat{\rho} = 0.014$ и среднее понижение относительной плотности $\hat{\rho} = -0.008$ с рис. 5. Пусть $\hat{\tau} = 0$. Тогда, согласно (6), поправка и среднее понижение величины (1) равны $0.11 \cdot 0.014 / 0.74 = 2.1 \cdot 10^{-3}$ и $\approx -10^{-3}$. Видим, эти значения неплохо согласуются с зависимостью (1) на рис. 3.

Величина (1), изменение которой инициируется нагревающим воздействием, называют transient thermorefectance (TTR) [1]. Действительно, нагрев нагревающим импульсом формирует акустическую волну (см. п. 4) и понижает плотность пленки (упомянутое выше $\hat{\rho} = -0.008$ и $\Delta R/R_0 \approx -0.001$). С другой стороны, появление акустического эха связано именно с силовыми напряжениями.

7. Нелинейное уширение характеристик ВС. Изменение наклона и, соответственно, уширение участка характеристик ВС в качественном отношении описано выше на рис. 2. На рисунке 7 количественно сравниваются ситуации со слабым (нелинейностью на рассматриваемых временах можно пренебречь) $F_{abs} = 0.906 \text{ мДж/см}^2$ и более сильным (нелинейность существенна) $F_{abs} = 10.87 \text{ мДж/см}^2$ нагревающими воздействиями. Они относятся к энергиям нагревающего импульса 0.1 и 1.2 мкДж. Разница в 12

раз. Показан момент $t = 20$ пс, относящийся ко 2-му полупериоду. Характеристики ВС и волна RW один раз отразились от границ. Видим, что участок ВС мгновенного профиля более сильного импульса наклонился сильнее. Соответственно максимум плотности и частоты ω_p придет на границу fr позже. Это проявится в задержке прибытия максимума пика, см. рис. 8 – П-образная метка.

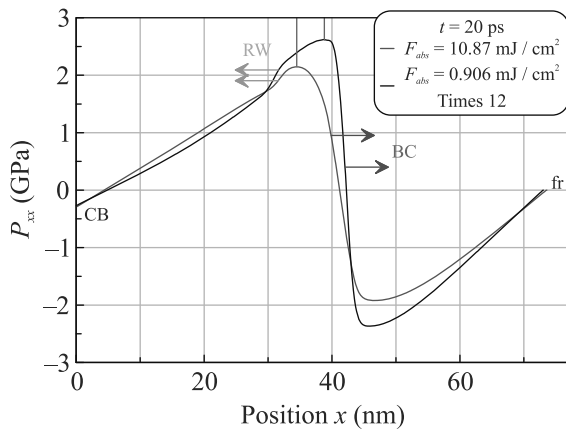


Рис. 7. (Цветной онлайн) Иллюстрация усиления нелинейного явления при увеличении энергии. Нелинейность проявляется в наклоне участка ВС. Видим, что из-за наклона максимум ρ в более сильной волне отстает от более слабой. Максимумы движутся право. Отставание показано зелеными вертикалями. Отставание приводит к сдвигу максимума акустического пика, отмеченного П-образной меткой на рис. 8. Амплитуда слабой волны увеличена в $12 = 1.2/0.1$ раз, чтобы сравнить слабое и сильное воздействия, см. текст

На рисунке 8 представлен экспериментально обнаруженный нелинейный эффект. Для сопоставления сигналов (1) с разными значениями F_{abs} , слабый сигнал увеличен в отношении энергий раз (в 12 раз). Погрешность, показанная на рис. 8 для синей кривой, не масштабировалась в 12 раз. Погрешности красной кривой такой же величины. Они не показаны, чтобы не загромождать рисунок. Поэтому чем слабее воздействие, тем более шумным оказывается сигнал (1).

8. Заключение. Проанализированы оптоакустические явления в тонкопленочной структуре. В опытах применен высокоточный метод синхронного детектирования (СД) и 2Т численное моделирование с учетом упругости никеля. Насколько нам известно, анализ процесса выхода волны разрежения RW на фронтальную границу fr ранее не проводился. Волна RW инициируется на короткой 2Т стадии на контакте никель–стекло.

Метод синхронного детектирования применен

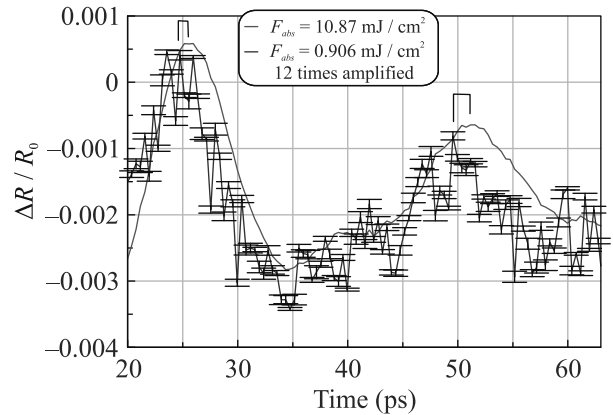


Рис. 8. (Цветной онлайн) Проявление нелинейности заключается в обнаруженной нами задержке акустических пиков при более сильных нагревающих воздействиях (красная кривая) по сравнению со слабыми воздействиями (синяя зависимость с указанием погрешности). Соответствующие задержки для 1-го и 2-го эха указаны П-образными метками

при предельной для этого метода энергетике. Описано накопление тепла при многократных повторениях нагревающих воздействий. Обсуждается, чем определяется предел применимости метода – постепенный нагрев или растрескивание при термоциклировании или их комбинация. При этом точность набора статистики измерений (1) определяется нагревом, а разрушение образца до его плавления формированием сети микротрещин (см. [31]).

Впервые обнаружены проявления нелинейности в методе СД, широко применяемом в опытах с лазерами. Предыдущие работы по этой важной тематике использовали линейное акустическое приближение.

Наш подход с повышением энергии в опытах с СД указывает путь к созданию комбинированных методик измерения оптических свойств в широком диапазоне энергий. При слабой энергетике применяется СД (многократные воздействия), которое непрерывно переходит в методику однократных измерений [29, 35] при большой энергии лазерного импульса.

Финансирование работы. Эксперимент поддержан Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение с Объединенным институтом высоких температур Российской академии наук # 075-00270-24-00). Расчеты выполнены в рамках Госзадания Института теоретической физики им. Ландау Российской академии наук (FFWR-2024-0013). Эксперименты выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования “Лазерный фемтосекундный комплекс”

(ЦКП ЛФК) Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

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

1. Carolyn A. Paddock and Gary L. Eesley, J. Appl. Phys. **60**(1), 285 (1986).
2. C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, and J. Tauc, Phys. Rev. B **34**, 4129 (1986).
3. S.-S. Wellershoff, J. Hohlfeld, J. Guedde, and E. Matthias, Appl. Phys. A **69** (Suppl 1), S99 (1999).
4. N. Del Fatti, C. Voisin, M. Achermand, S. Tzortzakakis, D. Christofilos, and F. Vallée, Phys. Rev. B **61**, 16956 (2000).
5. А. А. Мельников, О. В. Мисочко, С. В. Чекалин, Письмв в ЖЭТФ **89** 148 (2009).
6. I. Razdolski, D. Makarov, O. G. Schmidt, A. Kirilyuk, T. Rasing, and V. V. Temnov, ACS Photonics **3**(2), 179 (2016).
7. O. Matsuda, M. C. Larciprete, R. Li Voti, and O. B. Wright, Ultrasonics **56**, 3 (2015).
8. C. Thomsen, J. Strait, Z. Vardeny, H. J. Maris, J. Tauc, and J. J. Hauser, Phys. Rev. Lett. **53**, 989 (1984).
9. S. Edward, H. Zhang, I. Setija, V. Verrina, A. Antoncacci, S. Witte, and P. Planken, Phys. Rev. Appl. **14**, 014015 (2020).
10. H. Zhang, A. Antoncacci, S. Edward, I. Setija, P. Planken, and S. Witte, Phys. Rev. Appl. **13**, 014010 (2020).
11. C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, and J. Tauc, Opt. Commun. **60**(1), 55 (1986).
12. V. E. Gusev and P. Ruello, Appl. Phys. Rev. **5**(3), 031101 (2018).
13. A. Devos and R. Côte, Phys. Rev. B **70**, 125208 (2004).
14. J. D. G. Greener, E. de Lima Savi, A. V. Akimov, S. Raetz, Z. Kudrynskiy, Z. D. Kovalyuk, N. Chigarev, A. Kent, A. Patané, and V. Gusev, ACS Nano **13**(10), 11530 (2019).
15. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, J. Appl. Phys. **43**(11), 4669 (1972).
16. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and V. E. Fortov, *Shock-Wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter*, Springer-Verlag New York, Inc. (2004).
17. E. B. Zaretsky and G. I. Kanel, J. Appl. Phys. **110**(7), 073502 (2011).
18. P. Tengdin, W. You, C. Chen, X. Shi, D. Zusin, Y. Zhang, C. Gentry, A. Blonsky, M. Keller, P. M. Oppeneer, H. C. Kapteyn, Zh. Tao, and M. M. Murnane, Sci. Adv. **4** 1 (2018).
19. V. V. Temnov, I. Razdolski, T. Pezeril, D. Makarov, D. Seletskiy, A. Melnikov, and K. A. Nelson, J. Opt. **18**(9), 093002 (2016).
20. J. M. Klopff A. P. Caffrey, P. E. Hopkins, and P. M. Norris, Microscale Thermophysical Engineering **9**(4), 365 (2005).
21. P. E. Hopkins, J. M. Klopff, and P. M. Norris, Appl. Opt. **46**(11), 2076 (2007).
22. S. I. Ashitkov, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, Yu. V. Petrov, S. A. Romashevskiy, D. S. Sitnikov, E. V. Struleva, and V. A. Khokhlov, High Temperature **60**(2), 192 (2022).
23. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, S. A. Romashevskiy, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovskiy, and S. I. Ashitkov, JETP Lett. **117**, 104 (2023).
24. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, С. А. Ромашевский, Ю. В. Петров, М. А. Овчинников, С. И. Ашитков, ЖЭТФ **165**(2), 165 (2024).
25. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskiy, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev, P. S. Komarov, A. V. Ovchinnikov, D. S. Sitnikov, Yu. V. Petrov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, and V. E. Fortov, Contrib. Plasma Phys. **51**(4), 367 (2011).
26. D. P. Blair and P. H. Sydenham, J. Phys. E. **8**(8), 621 (1975).
27. M. Å. Ordal, R. J. Bell, R. W. Alexander, L. L. Long, and M. R. Query, Appl. Opt. **26**(4), 744 (1987).
28. V. E. Gusev and A. A. Karabutov, *Laser Optoacoustics*, AIP press, American Institute of Physics, N.Y. (1993).
29. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, Yu. V. Petrov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, K. Nishihara, and V. E. Fortov, JETP **107**(1), 1 (2008).
30. H. Kempf, P. Sulzer, A. Liehl, A. Leitenstorfer, and R. Tenne, Commun Phys. **6**, 145 (2023).
31. F. Akhmetov, I. Milov, S. Semin, F. Formisano, N. Medvedev, J. M. Sturm, V. V. Zhakhovskiy, I. A. Makhotkin, A. Kimel, and M. Ackermann, Vacuum, **212** 112045 (2023).
32. Yu. V. Petrov and N. A. Inogamov, JETP Lett. **98**(5), 278 (2013).
33. N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, S. I. Anisimov, A. M. Oparin, N. V. Shaposhnikov, D. von der Linde, and J. Meyer-ter Vehn, JETP Lett. **69**, 310 (1999).
34. С. И. Анисимов, Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Известия АН, Механика жидкости и газа **6**, 149 (1999).
35. S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, G. I. Kanel', P. S. Komarov, and V. E. Fortov, JETP Lett. **92**(8), 516 (2010).
36. V. V. Zhakhovskii and N. A. Inogamov, JETP Lett. **92**(8), 521 (2010).
37. X. W. Wang, A. A. Kuchmizhak, X. Li, S. Juodkazis, O. B. Vitrik, Yu. N. Kulchin, V. V. Zhakhovskiy, P. A. Danilov, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, A. A. Rudenko, and N. A. Inogamov, Phys. Rev. Appl. **8**(4), 044016 (2017).
38. S. A. Romashevskiy, V. A. Khokhlov, S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovskiy, N. A. Inogamov, P. S. Komarov, A. N. Parshikov, Yu. V. Petrov, E. V. Struleva, and P. A. Tsygankov, JETP Lett. **113**, 308 (2021).

39. A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, L. V. Seleznev, and D. V. Sinitsyn, JETP Lett. **94**, 753 (2012).
40. V. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, S. I. Anisimov, and N. A. Inogamov, JETP Lett. **71**(4), 167 (2000).
41. A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, L. V. Seleznev, D. V. Sinitsyn, V. N. Lednev, and S. M. Pershin, JETP **121**, 737 (2015).
42. A. A. Ionin and S. I. Kudryashov, JETP Lett. **104**, 573 (2016).
43. S. I. Kudryashov and A. A. Ionin, Int. J. Heat Mass Transf. **99**, 383 (2016).
44. V. V. Shepelev, Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, E. A. Perov, and S. V. Fortova, Optics and Laser Technology **152**, 108100 (2022).
45. S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, and V. A. Khokhlov, JETP **129**(4), 757 (2019).

Геометрическая фаза как основа квантовой акселерометрии

А. М. Ростом, В. А. Томили¹⁾, Л. В. Ильичёв

Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Институт лазерной физики Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 10 июля 2024 г.

После переработки 29 августа 2024 г.

Принята к публикации 30 августа 2024 г.

Предложена концептуальная модель перспективного квантового акселерометра на основе двухмодового атомарного конденсата Бозе–Эйнштейна. Ускорение порождает специфическую разницу геометрических фаз между модами конденсата, сдвигающую картину интерференции волн материи. Моды имеют конфигурации колец, в плоскости которых лежит вектор измеряемого ускорения. Однородность потенциалов кольцевых конфигураций нарушена дополнительными локализованными потенциалами-дефектами. При надлежащем расположении и структуре дефектов в результате вариации их параметров волновые функции мод конденсата приобретают геометрические фазы, различающиеся при наличии ускорения. Вычисления, проведенные для кольцевых конфигураций конденсата атомов ^{87}Rb радиуса 0.25 мкм , показывают, что предлагаемая схема способна регистрировать микрогравитацию порядка $10^{-6} \div 10^{-7} g$.

DOI: 10.31857/S0370274X24100124, EDN: QNNZOG

1. Введение. Прецизионные измерения ускорения свободного падения играют важную роль как в прикладных задачах геодезии и навигации [1–3], так и в фундаментальных исследованиях. Среди последних стоит отметить исследования, посвященные проверке принципа эквивалентности в общей теории относительности [4]. В связи с этим весьма актуально создание высокочувствительных инерциальных датчиков – гравиметров или акселерометров. Перспективным подходом для решения этой задачи является использование интерференции волн материи. Подобные устройства уже превзошли классические гравиметры в точности измерений. На их основе предложены эксперименты по проверке соотношения неопределенности на планковских масштабах [5] и построению моделей квантовой гравитации [6]. Принцип действия атомных гравиметров основан на регистрации интерференции от свободно падающих атомов при помощи рамзеевской интерферометрии [7]. С их помощью были проведены прецизионные измерения ускорения свободного падения Земли с относительной точностью, превышающей 10^{-12} [8, 9].

Близкими родственниками гравиметров является другая разновидность инерциальных датчиков – гироскопы, способные измерять угловую скорость (или

ускорение) вращения системы отсчета устройства. Они также могут быть реализованы с использованием принципов интерференции волн материи. Весьма актуальными являются исследования по построению квантовых гироскопов на основе атомных интерферометров [10–12]. Экспериментально продемонстрированные результаты уже сравнимы и даже превышают по точности классические гироскопы [13, 14]. Большинство таких устройств основано на измерении оптического аналога фазы Саньяка [15–17]. Однако в [18] была предложена схема, основанная на измерении разницы специфических геометрических фаз двух локализаций атомарного бозе-конденсата, приобретаемых в результате варьирования параметров удерживающего потенциала. Главным требованием являлась чувствительность пространственных конфигураций мод конденсата к вращению его системы отсчета. Мы покажем, что данная схема может быть модифицирована для измерений линейного ускорения системы отсчета конденсата.

Следующие соображения иллюстрируют общую идею использования геометрической фазы в атомарном конденсате Бозе–Эйнштейна для регистрации неинерциальности его системы отсчета. Рассмотрим конденсат, состоящий из пространственных мод 1 и 2. Для простоты полное число частиц N в конденсате предполагается фиксированным. Вектор состояния конденсата в фокских базисах обеих мод

¹⁾e-mail: 8342tomilin@mail.ru

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^N f_n |n\rangle_1 \otimes |N-n\rangle_2 \quad (1)$$

задается амплитудами вероятности f_n , которые определяют картину интерференции частиц из разных мод. Предполагается, что конфигурации мод делают состояние конденсата чувствительным к неинерциальности его системы отсчета. В результате циклической вариации параметров потенциалов, задающих конфигурации мод, их волновые функции приобретают геометрические фазы θ_1 и θ_2 [19]. Обеспечив различие восприимчивостей модовых конфигураций к неинерциальности движения, эти фазы могут быть сделаны разными, что приводит к нетривиальному преобразованию состояния конденсата:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^N f_n |n\rangle_1 \otimes |N-n\rangle_2 \mapsto \\ & \mapsto \sum_{n=0}^N f_n e^{in\theta_1} |n\rangle_1 \otimes e^{i(N-n)\theta_2} |N-n\rangle_2, \end{aligned} \quad (2)$$

т.е. $f_n \mapsto f_n e^{in(\theta_1 - \theta_2)}$. Разница фаз $\theta_1 - \theta_2$ может быть измерена по сдвигу картины интерференции атомов из разных мод. Целесообразно подходящим выбором конфигураций мод обеспечить ненулевую разницу фаз только в присутствии ускорения.

Целью работы является построение модели акселерометра, основанного на измерении разности геометрических фаз мод атомарного конденсата. В разделе 2 рассмотрена пространственная конфигурация мод, пригодная для решения этой задачи. В разделе 3 приведены численные результаты, иллюстрирующие возможности акселерометра.

2. Модель. Рассмотрим модель двухмодового атомарного конденсата²⁾, состоящего из частиц массы m . Каждая мода имеет тороидальную пространственную конфигурацию, с внутренним радиусом много меньше внешнего, который мы будем обозначать R . Хорошим начальным приближением для описания такой конфигурации является одномерное кольцо, положение частиц на котором описывается угловой координатой $\varphi \in [0, 2\pi)$. Кольца ориентированы так, что вектор ускорения $\mathbf{g}$ системы отсчета конденсата лежит в плоскости каждого кольца (см. рис. 1). От направления этого вектора отсчитываются угловые координаты. В таком виде задача эквивалентна задаче о квантовом маятнике [20, 21]. Стационарное уравнение Шредингера для одночастичной

²⁾Взаимодействие в конденсате не является существенным для нашей задачи, поэтому для простоты будем его исключать.

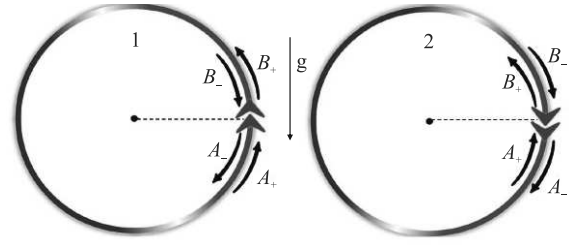


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема акселерометра. Потенциальные дефекты на кольцевых модах 1 и 2 отмечены стрелками, направление стрелок определяет ориентацию кольца

волновой функции конденсата в безразмерных переменных оказывается уравнением Матье

$$\frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) + (\kappa^2 - 2q \cdot \cos 2z) \Psi(z) = 0, \quad (3)$$

где $z = 2\varphi$ – новая угловая переменная, $\kappa^2 = 8mR^2 \times (E - mgR)/\hbar^2$ – безразмерная “кинетическая энергия”, $q = 4m^2 R^3 g/\hbar^2$ – безразмерная эффективная глубина потенциала, создаваемого ускорением.

Для реализации изложенной во Введении идеи акселерометра необходима различная реакция мод конденсата на ускорение. Для этого, как показано на рис. 1, обе кольцевые структуры нарушены на некоторых участках дополнительными потенциалами, именуемыми дефектами. Дефекты расположены так, что вектора, направленные к ним из центра каждого кольца, ортогональны вектору ускорения. Будем считать в каждой получившейся паре вектор ускорения первым (он одинаковый в обеих парах), а вектора к дефектам – вторыми. Если при этом дефекты способны задать ориентации на кольцах (направления их обходов), с каждой модой оказывается связанной ортогональная тройка векторов. Третьи вектора для каждого кольца нормальны их плоскостям и определяются известным образом из направлений обходов. Из рисунка 1 видно, что одна из троек правая, а другая – левая. Это обстоятельство обеспечивает требуемое различие реакций мод на ускорение. Описание дефектов с помощью трансфер-матриц было использовано в моделях квантовых гироскопов [18, 22] и оказалось очень удобным в предположении, что дефект локализован в одной точке кольца. Уравнение (3) справедливо при этом на всем кольце, кроме места расположения дефекта. Описывающая его трансфер-матрица M связывает амплитуды волн материи по разные стороны дефекта и принадлежит группе унитарных унимодулярных матриц [23]:

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & v \\ \bar{v} & \bar{u} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix} \doteq \mathcal{M} \cdot \begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix}, \quad |u|^2 - |v|^2 = 1. \quad (4)$$

Здесь черта над символом означает комплексное сопряжение. Дополнительная связь между амплитудами $A_{\pm}, B_{\pm}$ может быть найдена из следующих соображений. Для определенности рассматривается случай, когда дефект расположен в точке $z = \pi/4$. По определению, решение уравнения (3) в нижней (относительно рис. 1) окрестности барьера имеет вид

$$A_+ e^{i\kappa(z+\pi/4)} + A_- e^{-i\kappa(z+\pi/4)}. \quad (5)$$

Решение в верхней окрестности, с учетом периодичности кольца

$$B_+ e^{i\kappa(z-3\pi/4)} + B_- e^{-i\kappa(z-3\pi/4)}. \quad (6)$$

С другой стороны, в самом месте расположения барьера эти решения и их производные должны совпадать с истинным решением уравнения (3):

$$\begin{aligned} A_+ + A_- &= \Psi(-\pi/4), \\ B_+ + B_- &= \Psi(3\pi/4), \\ i\kappa(A_+ - A_-) &= \Psi'(-\pi/4), \\ i\kappa(B_+ - B_-) &= \Psi'(3\pi/4). \end{aligned} \quad (7)$$

Общее решение уравнения (3) может быть представлено в виде

$$\Psi(z) = \psi_c \cdot ce(z) + \psi_s \cdot se(z), \quad (8)$$

где $ce(z)$ и $se(z)$ – четная и нечетная функции Маттье соответственно [24]. Подстановка этого решения в (7) и использование соотношения (4) приводит к однородной системе линейных уравнений на коэффициенты $\psi_{c,s}$. Условие ее совместности имеет вид

$$\begin{aligned} &\kappa^2 \cdot (u + v - \bar{u} - \bar{v}) \times \\ &\left[ce(3\pi/4) \cdot se(-\pi/4) - ce(-\pi/4) \cdot se(3\pi/4) \right] + \\ &(u - v - \bar{u} + \bar{v}) \times \\ &\left[ce'(3\pi/4) \cdot se'(-\pi/4) - ce'(-\pi/4) \cdot se'(3\pi/4) \right] = \\ &i\kappa \cdot \left[2 \left(ce(3\pi/4) \cdot se'(3\pi/4) - ce'(3\pi/4) \cdot se(3\pi/4) + \right. \right. \\ &\left. \left. ce(-\pi/4) \cdot se'(-\pi/4) - ce'(-\pi/4) \cdot se(-\pi/4) \right) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &(u + v + \bar{u} + \bar{v}) \times \\ &\left(ce(3\pi/4) \cdot se'(-\pi/4) - ce'(-\pi/4) \cdot se(3\pi/4) \right) + \\ &(u - v + \bar{u} - \bar{v}) \times \\ &\left(ce'(3\pi/4) \cdot se'(-\pi/4) - ce(-\pi/4) \cdot se'(3\pi/4) \right) \Big]. \quad (9) \end{aligned}$$

Функции Маттье также зависят от параметров κ и q , входящих в (3). При заданном q выражение (9) является неявным уравнением на параметр κ , т.е. определяет энергетический спектр моды.

Потенциальный дефект характеризуется трансфер-матрицей, которая в свою очередь зависит от параметров u и v . Задания взаимно противоположных ориентаций колец можно достигнуть, если представить трансфер-матрицы дефектов в виде произведения двух различных более простых трансфер-матриц³⁾, взятых в прямом и обратном порядке:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_1 &= \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & i \sinh(\eta) \\ i \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \end{pmatrix}, \\ \mathcal{M}_2 &= \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & i \sinh(\eta) \\ i \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

Одна из этих матриц соответствует изменению амплитуды, а другая – изменению фазы прошедшей и отраженной волн. Пространство параметров трансфер-матриц дефектов в нашей модели оказывается цилиндром бесконечной длины.

Вариация параметров дефекта (достаточно медленная, чтобы не вызвать переходы между стационарными состояниями) по некоторому замкнутому контуру приводит к появлению у состояния системы геометрической фазы. В качестве такого контура выберем циклическое изменение α от 0 до 2π при фиксированном η (см. выше), т.е. поперечное сечение бесконечного цилиндра. Тогда эта дополнительная геометрическая фаза дается следующим выражением [19]:

$$\theta_g = \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\langle \Psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi_\alpha \rangle - \langle \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle}{\langle \Psi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle} d\alpha, \quad (11)$$

где Ψ_α – волновая функция стационарного состоя-

³⁾ Можно показать, что любая трансфер-матрица может быть представлена в виде произведения двух “элементарных” трансфер-матриц, каждая из которых относится к одному из трех типов [23].

ния моды, вычисленная при данном значении α , а скалярные произведения вычисляются по формуле

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_0^\pi \Psi^*(z) \Phi(z) dz. \quad (12)$$

Отметим, что форма записи (11) инвариантна относительно нормировки волновой функции. Интерес представляет разность $\Delta\theta_g \doteq \theta_g^{(1)} - \theta_g^{(2)}$ геометрических фаз, приобретаемых модами конденсата при *одинаковой* вариации *противоположно* ориентированных дефектов, как функция параметра q .

Из формы выражения (11) ясно, что для того, чтобы геометрическая фаза была ненулевой, функция Ψ_α должна быть комплекснозначной. Однако уравнение Шредингера (3) имеет лишь действительные коэффициенты. Действительными являются и функции Матье $ce(z)$ и $se(z)$. Значит комплексными должны быть амплитуды $\psi_{c,s}$. Таким образом, единственной возможностью добиться ненулевой геометрической фазы является использование потенциального дефекта с комплекснозначной трансформатрицей. Этим и объясняется выбор элементарных составляющих дефекта в выражении (10).

Отдельного внимания заслуживает обсуждение решений уравнения (3). Литература, посвященная применению функций Матье к физическим задачам, как правило, ограничивается рассмотрением 2π -периодических по угловой переменной решений. Это условие при заданном значении q дает бесконечный счетный набор значений κ и таким образом определяет уровни энергии системы (как, например, в задаче о квантовом маятнике). Рассматриваемая нами задача существенно отличается наличием на кольце потенциального дефекта. Заданные в нем граничные условия (4) заменяют собой условие периодичности. Более того, нетрудно видеть, что вытекающее из граничных условий условие совместности (9) теряет смысл при подстановке в него 2π -периодических функций. Поэтому следует рассматривать все возможные решения (9) без учета их периодичности.

Любое решение уравнения Матье представимо в виде

$$e^{irz} f(z), \quad (13)$$

где $f(z)$ – π -периодическая функция, а число $r \in \mathbb{C}$, зависящее от параметров q и κ , называется характеристическим показателем [24]. Таким образом, периодические решения (с любым периодом) имеют действительный целый либо дробно-рациональный характеристический показатель. Возможные при данных q и κ значения характеристического показателя принято иллюстрировать при помощи так называемой диаграммы устойчивости (см. рис. 2). Видно,

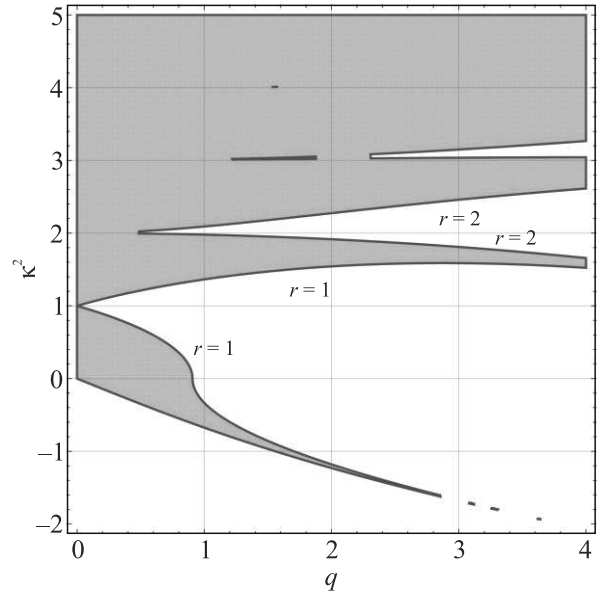


Рис. 2. (Цветной онлайн) Диаграмма устойчивости решений уравнения Матье. В заштрихованной области характеристический показатель является действительным, а решение – устойчивым. На границах области устойчивости характеристический показатель принимает постоянные значения, отмеченные на рисунке

что при заданном q зависимость характеристического показателя r от параметра κ не является всюду гладкой, а терпит скачки при переходе между областями устойчивости и неустойчивости. При варьировании потенциального дефекта значение κ становится функцией варьируемого параметра α и меняется в определенном диапазоне. Поскольку в определение геометрической фазы (11) входят производные по α , то следует убедиться, что выбранные корни соотношения (9) полностью (при любом α) лежат в отмеченной на рис. 2 области устойчивости⁴).

3. Результаты и обсуждение. В первую очередь необходимо найти корни соотношения (9). Как и в случае обычного квантового маятника, они образуют бесконечный дискретный набор. На рисунке 3 представлен их характерный вид как функции α . Из-за наличия дефекта и граничных условий (4) реше-

⁴ Хотя гладкость пути в пространстве параметров, по которому производится варьирование, не является необходимым условием для определения геометрической фазы, ее отсутствие может привести к серьезным вычислительным трудностям. Кроме того, в области неустойчивости характеристический показатель является комплексным, что приводит к неограниченности решений уравнения Матье как функций z . Хотя, как обсуждалось выше, решения задачи не обладают периодичностью по z , и нормировка может осуществляться на любом интервале длины π , удобнее выбрать ограниченные решения.

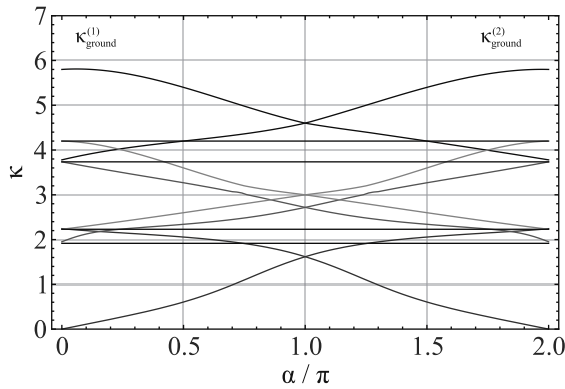


Рис. 3. (Цветной онлайн) Уровни энергии как функции параметра α при $q = 2, \eta = 1$. Верхними индексами 1 и 2 отмечены решения для соответствующих мод конденсата. Состояния, выбранные для вычисления геометрической фазы, отмечены жирными линиями, а пунктиром – решения, не лежащие целиком в области устойчивости. Точками обозначены уровни энергии при $\alpha = 0$

ния уравнения (3) не являются 2π -периодичными. Вместо этого имеется симметрия относительно сдвигов параметра α , кратных 2π . А именно, вся картина энергетических уровней инвариантна относительно одновременного сдвига *всех* энергетических кривых, представленных на рис. 3. Однако, как следует из сравнения с рис. 3, в действительности не все из этих корней соответствуют решениям, имеющим действительный характеристический показатель при всех значениях параметра α . В частности, для использованного для вычислений кривых на рис. 3 значения q минимально допустимое значение κ составляет порядка 3. Поэтому для вычисления геометрической фазы было выбрано состояние, обозначенное жирной кривой на рис. 3. В пределе больших q при фиксированных параметрах дефекта его значение становится пренебрежимо малым, а близкие к основному уровню энергии приближаются к уровням энергии гармонического осциллятора [20].

Как видно из рис. 3, одинаковая вариация дефекта приводит к различным изменениям энергий (и волновых функций) основных состояний различных мод. В результате приобретаемые ими геометрические фазы также различаются. Их разница, вычисленная при помощи выражения (11), представлена на рис. 4.

Обсудим полученные результаты. При нулевом q геометрические фазы, приобретаемые обеими модами одинаковы, как и следовало ожидать. Зависимость $\Delta\theta_g$ не является ни четной, ни нечетной функцией q – это связано с отсутствием такой симметрии в уравнении Маттье и начальных условиях. Одному

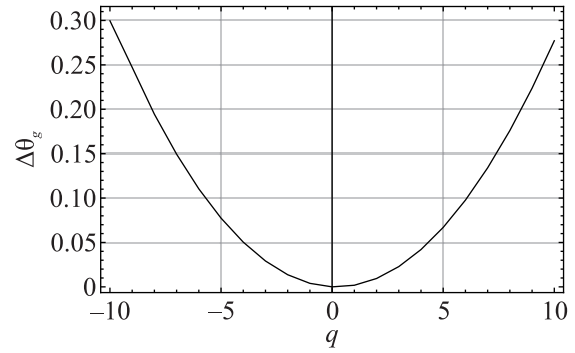


Рис. 4. Разность геометрических фаз мод конденсата, полученных в результате вариации потенциального дефекта по контуру $\alpha \in [0, 2\pi]$, $\eta = 1$, как функция ускорения свободного падения q

и тому же значению $\Delta\theta_g$ соответствуют два возможных значения q . Если известно направление поля тяжести, то по полученной зависимости величина ускорения свободного падения определяется однозначно.

Оценим точность измерения параметра q в рассмотренной схеме. Поскольку квантовое состояние системы параметрически зависит от него, то неопределенность измерения δq дается неравенством Крамера–Рао [25]:

$$\delta q \geq \frac{1}{\sqrt{n_{\text{exp}}} \cdot \sqrt{I_q}} \doteq \frac{\delta q^{(\min)}}{\sqrt{n_{\text{exp}}}}, \quad (14)$$

где n_{exp} – число повторений интерферометрического измерения разности геометрических фаз, а I_q – квантовая информация Фишера, соответствующая измерению q . Поскольку состояние системы в результате приобретения геометрической фазы остается чистым и имеет вид (2), то квантовая информация Фишера принимает вид [26]

$$I_q = 4 \left| \frac{\partial \Delta\theta_g}{\partial q} \right|^2 \cdot (\Delta n)^2, \quad (15)$$

где $(\Delta n)^2$ – дисперсия числа атомов в моде 1. В случае биномиального распределения атомов по ямам (с равными вероятностями появления атома в каждой из них) $(\Delta n)^2 = N_{\text{at}}/4$. На рисунке 5 представлены значения $\delta q^{(\min)}$ при различных q . Относительная точность измерения при $q = 10$ и $N_{\text{at}} = 100$ составляет порядка двух процентов.

В процессе проведения интерференционного эксперимента возможны потери атомов при наложении пространственных конфигураций конденсата. Этот эффект можно промоделировать добавлением атомных делителей пучка с конечным коэффициентом пропускания T , как это сделано в работе [27]. Для

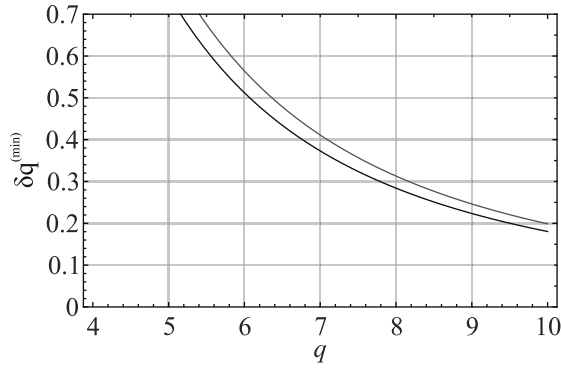


Рис. 5. (Цветной онлайн) Точность измерения $\delta q^{(\min)}$ параметра q при $N_{\text{at}} = 100$. Сплошная кривая соответствует идеальному наблюдению интерференции, а пунктирная – при потере 30 процентов атомов в одной из мод ($T = 0.7$, см. пояснения в тексте)

простоты предполагаются потери только в одной из пространственных мод (для определенности в моде 1). Обозначим состояние конденсата при наличии внешнего ускорения q после генерации геометрической фазы $|\Psi(q)\rangle$ (его общий вид приведен в правой части выражения (2)). Тогда состояние конденсата после потери атомов будет даваться выражением, где операторы Крауса $\hat{K}_i$ отвечают ситуациям с потерей i атомов [27]:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_{i=0}^{N_{\text{at}}} \hat{K}_i |\Psi(q)\rangle \langle \Psi(q)| \hat{K}_i^\dagger \doteq \sum_{i=0}^{N_{\text{at}}} p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \\ \hat{K}_i &\doteq \frac{(\sqrt{1-T})^i}{\sqrt{i!}} (\sqrt{T})^{\hat{n}} \hat{a}^i, \\ p_i &\doteq \langle \Psi(q) | \hat{K}_i^\dagger \hat{K}_i | \Psi(q) \rangle, \\ |\psi_i\rangle &\doteq \frac{\hat{K}_i}{\sqrt{p_i}} |\Psi(q)\rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Вычисление информации Фишера при больших N_{at} затруднительно, однако можно оценить ее сверху, воспользовавшись свойством выпуклости [27, 28] (вычисление дополнительно упрощается тем обстоятельством, что величины p_i не зависят от геометрической фазы и, следовательно, от q):

$$I_q \leq \tilde{I}_q \doteq 4 \left| \frac{\partial \Delta \theta_q}{\partial q} \right|^2 \cdot \sum_i p_i (\Delta n)_i^2, \quad (17)$$

где $(\Delta n)_i^2$ – дисперсии чисел атомов в моде 1, вычисленные по состояниям $|\psi_i\rangle$, введенным в (16). Результаты вычислений соответствующей точности измерения $\delta q^{(\min)}$ приведены на рис. 5. Видно, что потеря даже 30 процентов атомов в одной из мод не оказывает существенного влияния на точность измерения.

Проведенное рассмотрение позволяет заключить, что разработанная схема в перспективе пригодна для измерения ускорений. Ее особенностью является фактическое отсутствие движущихся частей – в отличие от известных схем на волнах материи, в которых регистрируется разлет и интерференция свободно падающих атомов и атомных ансамблей. Вместо этого необходимо организовать интерференцию предварительно приготовленных мод атомного конденсата в кольцевых конфигурациях с локализованным дефектом. Задача создания атомарного конденсата в рассмотренной конфигурации в движущейся с ускорением системе отсчета сама по себе является нетривиальной. Проведение интерференционного эксперимента с неизбежностью разрушает двухмодовую структуру конденсата, и для проведения следующего измерения процедуру нужно повторять.

Самостоятельной и важной проблемой является реализация структуры дефекта, необходимой для работы схемы. В настоящей работе мы воспользовались удобной математической моделью трансформации дефекта, посредством которой в задаче появляются комплексные числа и, следовательно, само понятие фазы. Преследовалась цель демонстрации основной идеи акселерометра. Разработка конкретной физической модели дефекта, играющего ту же роль, станет предметом отдельной будущей работы⁵⁾.

Помня об исключительно модельном характере рассматриваемых дефектов, приведем численные оценки. Если конденсат состоит из атомов ^{87}Rb в кольцевых конфигурациях радиуса 0.25 мкм с дефектами, где $\eta \sim 1$, рассмотренный диапазон значений $q \sim 1 \div 10$ позволяет измерять ускорения $\sim 10^{-6} \div 10^{-7}g$, т.е. данная схема лучше приспособлена для измерения микрогравитации. Это позволяет надеяться на ее возможные приложения к задачам космической навигации [29]. Возможности реализации атомных интерферометров в условиях микрогравитации сейчас активно исследуются [30–32]. Актуальность этой задачи связана с повышением точности измерений за счет увеличения времени распространения волн материи через атомный интерферометр [33, 34]. К настоящему моменту наилучшая достигнутая точность измерений при суборбитальных экспериментах составляет порядка $10^{-5}g$ при измерении ускорений порядка $10^{-3}g$ [35, 36], и потенциально до $10^{-12}g$ в экспериментах с бозе-конденсатом,

⁵⁾Заметим, что при разработке идеи квантового гироскопии с прицелом на измерение геометрической фазы также присутствовали аналогичные этапы, отраженные в [18] и [22].

содержащим 10^4 атомов ^{87}Rb , в башне свободного падения [37]. Расчеты, проведенные в [38] для альтернативной схемы с использованием атомного интерферометра Фабри–Перо, показывают относительную точность порядка 0.2 при измерении ускорений порядка $10^{-4}g$ при $N_{\text{at}} = 100$ (аналогично вычислению на рис. 5). Таким образом, хотя проведенные в настоящей работе оценки сделаны для идеализированной модели, они позволяют сделать вывод о потенциальной пригодности схемы для гравиметрических измерений в условиях микрогравитации.

Полезно сравнить рассматриваемую схему акселерометра с ранее предложенной в [18] схемой гироскопа, также использующей генерацию разности геометрических фаз в двух кольцевых модах конденсата, нарушенных задающими ориентацию локализованными дефектами. Отличия от работы [18] более значительны, чем может показаться с первого взгляда. Роли кольцевых структур мод конденсата в схемах гироскопа и акселерометра совершенно различны: в гироскопе они используются как индикаторы кривизны пространства во вращающейся системе отсчета. Для этой цели важна величина охватываемой площади, но не строгая кольцевая форма мод конденсата, хотя последняя существенно упрощает теоретическое рассмотрение. Для предлагаемой схемы акселерометра форма кольца принципиальна, поскольку должна имитировать математический маятник – в ином случае влияние внешнего ускорения будет сложно выделить на фоне движения в удерживающем потенциале моды. Также радикально отлична от схемы гироскопа из [18] функция дефектов, нарушающих однородность кольцевых форм мод в схеме акселерометра. Прежде всего следует заметить, что их расположение на кольцах по отношению к измеряемому ускорению принципиально. Но более важен другой аспект. В случае гироскопа само стационарное уравнение Шредингера содержало член с мнимой единицей, добавляющий волновым функциям необходимую комплексность для появления геометрической фазы. В этом контексте дополнительных специфических требований, кроме задания ориентации, к свойствам дефекта нет. В [22] было показано, что для этого вполне достаточно комбинации потенциального барьера и потенциальной ямы. Иная ситуация в модели акселерометра. Возникает обсуждавшееся выше требование к дефекту – помимо задания ориентации на кольце, он должен привести в рассмотрение комплексность и, как следствие, понятие фазы. Ввиду данного отличия предполагаемое развитие модели в части практически реализуемой формы дефектов не сведется к повторению [22].

4. Заключение. Рассмотрена принципиальная схема перспективного устройства для измерения ускорения его системы отсчета. Измеряемой величиной является разность геометрических фаз двух мод единого атомарного конденсата. Каждая мода имеет пространственную конфигурацию в виде кольца, нарушенного в определенном месте локализованным дефектом, задающим ориентацию кольца. Вариация параметров дефектов противоположно ориентированных мод приводит к возникновению в каждой из них геометрической фазы. Разность этих фаз может быть зарегистрирована в интерференционном эксперименте с волнами материи, испущенными модами конденсата. Преимуществом предлагаемой схемы является (в рамках рассмотренной модели дефектов) способность регистрировать очень малые ускорения (порядка $10^{-6}g$).

Финансирование работы. Работа поддержана грантом 23-12-00182 Российского научного фонда (<https://rscf.ru/project/23-12-00182/>).

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

1. M. van Camp, O. de Viron, H.-G. Scherneck, K.-G. Hinzen, S. D. P. Williams, T. Lecocq, Y. Quinif, and T. Camelbeeck, *J. Geophys. Res.* **116**, B08402 (2011).
2. D. Carbone, M. P. Poland, M. Diamant, and F. Greco, *Earth-Sci. Rev.* **169**, 146 (2017).
3. D. Crossley, J. Hinderer, and U. Ricciardi, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 046101 (2013).
4. S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity*, Wiley, N.Y. (1972).
5. D. Gao and M. Zhan, *Phys. Rev. A* **94**, 013607 (2016).
6. G. Amelino-Camelia, C. Lämmerzahl, F. Mercati, and G. M. Tino, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 171302 (2009).
7. A. Peters, K. Y. Chung, and S. Chu, *Nature* **400**, 849 (1999).
8. P. Asenbaum, C. Overstreet, M. Kim, J. Curti, and M. A. Kasevich, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 191101 (2020).
9. S. Fray and M. Weitz, *Space Sci. Rev.* **148**(1), 225?232 (2009).
10. T. L. Gustavson, P. Bouyer, and M. A. Kasevich, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2046 (1997).
11. J. K. Stockton, K. Takase, and M. A. Kasevich, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 133001 (2011).
12. D. Savoie, M. Altorio, B. Fang, L. A. Sidorenkov, R. Geiger, and A. Landragin, *Sci. Adv.* **4**, 7948 (2018).
13. I. Dutta, D. Savoie, B. Fang, B. Venon, C. L. Garrido Alzar, R. Geiger, and A. Landragin, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 183003 (2016).

14. C.L. Garrido Alzar, AVS Quantum Science **1**, 014702 (2019).
15. G. Sagnac, C. R. Acad. Sci. **157**, 708 (1913).
16. G. Sagnac, C. R. Acad. Sci. **157**, 1410 (1913).
17. G. Sagnac, J. Phys. (Paris) **4**, 177 (1914).
18. В. А. Томилин, Л. В. Ильичёв, ЖЭТФ **162**, 307 (2022).
19. M.V. Berry, Proc. R. Soc. London, Ser. A **392**, 45 (1984).
20. E.U. Condon, Phys. Rev. **31**, 891 (1928).
21. G.P. Cook and C.S. Zaidins, Am. J. Phys **54**, 259 (1986).
22. В. А. Томилин, Л. В. Ильичёв, Письма в ЖЭТФ **119**, 381 (2024).
23. L. L. Sánchez-Soto and D. Monzón, J. Carinena, Phys. Rep. **513**, 191 (2012).
24. Н. В. Мак-Лаклан, *Теория и приложения функций Матъе*, Издательство иностранной литературы, М. (1953).
25. C.W. Helstrom, *Quantum Detection and Estimation Theory*, Academic, N.Y. (1976).
26. S.L. Braunstein and C.M. Caves, Phys. Rev. Lett. **72**, 3439 (1994).
27. U. Dorner, R. Demkowicz-Dobrzanski, B.J. Smith, J.S. Lundeen, W. Wasilewski, K. Banaszek, and I. A. Walmsley, Phys. Rev. Lett. **102**, 040403 (2009).
28. A. Fujiwara, Phys. Rev. A **63**, 042304 (2001).
29. S. Abend, B. Allard, A. S. Arnold et al. (Collaboration), AVS Quantum Science **5**, 019201 (2023).
30. T. van Zoest, N. Gaaloul, Y. Singh et al. (Collaboration), Science **328**, 1540 (2010).
31. D. Becker, M.D. Lachmann, S.T. Seidel et al. (Collaboration), Nature **562**, 391 (2018).
32. J.R. Williams, C.A. Sackett, H. Ahlers et al. (Collaboration), Nat. Commun. **15**, 6414 (2024).
33. S. Dimopoulos, P.W. Graham, J.M. Hogan, and M. A. Kasevich, Phys. Rev. Lett. **98**, 111102 (2007).
34. H. Müller, S. Chiow, S. Herrmann, S. Chu, and K.-Y. Chung, Phys. Rev. Lett. **100**, 031101 (2008).
35. R. Geiger, V. Ménoret, G. Stern, N. Zahzam, P. Cheinet, B. Battelier, A. Villing, F. Moron, M. Lours, Y. Bidel, A. Bresson, A. Landragin, and P. Bouyer, Nat. Commun. **2**, 474 (2011).
36. B. Barrett, L. Antoni-Micollier, L. Chichet, B. Battelier, T. Lévêque, A. Landragin, and P. Bouyer, Nat. Commun. **7**, 13786 (2016).
37. H. Müntinga, H. Ahlers, M. Krutzik et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **110**, 093602 (2013).
38. P. Schach, A. Friedrich, J.R. Williams, W.P. Schleich, and E. Giese, EPJ Quantum. Technol. **9**, 20 (2022).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 120

Выпуск 8

25 октября 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>

© Российская академия наук, 2024

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2024

Универсальные импульсные распределения и короткодействующие корреляции нуклонов

О. А. Рубцова¹⁾, В. Н. Померанцев¹⁾

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

Поступила в редакцию 23 августа 2024 г.

После переработки 5 сентября 2024 г.

Принята к публикации 7 сентября 2024 г.

Исследуется проблема построения универсальных двухнуклонных импульсных распределений для основных NN -конфигураций 1S_0 и 3S_1 - 3D_1 , используемых при описании короткодействующих корреляций нуклонов в ядрах. Предложен новый метод вычисления таких распределений и изучены их свойства. В качестве иллюстраций приводятся расчеты для нескольких современных реалистических NN -потенциалов, включая взаимодействие, учитывающее ненуклонные степени свободы. Предложена новая характеристика, определяющая отношение долей высокимульсных компонент для спин-синглетных и спин-триплетных NN -распределений при низких энергиях, которая может быть полезна для сравнительной оценки изоспиновой зависимости короткодействующих корреляций при расчетах с различными потенциалами NN -взаимодействия.

DOI: 10.31857/S0370274X24100131, EDN: RGICNJ

1. Введение. В последние годы проблема короткодействующих корреляций (КДК) в ядрах [1, 2] стала очень актуальной благодаря новым эксклюзивным экспериментам по электрорасщеплению ядер ($e, e' NN$) в квазиупругой кинематике с регистрацией трех частиц на совпадение [3]. Продолжают уточняться и данные по инклюзивным и полуклассическим реакциям [4, 5]. Также проблема КДК исследуется и в экспериментах ($p, 2pN$), проводящихся на установке NICA [6, 7].

Сравнение экспериментальных данных с теоретическими предсказаниями, полученными в результате точного решения задачи многих тел с различными нуклон-нуклонными (NN) взаимодействиями, позволило бы решить проблему КДК. Однако, ввиду сложности решения задачи рассеяния с участием A нуклонов, при анализе КДК в ядрах с $A > 3$ неизбежно используются аппроксимации. Простейшей из них является плоско-волновое импульсное приближение (Plane-Wave Impulse Approximation), при котором сечение квазиупругого выбивания ($e, e' NN$) пропорционально спектральной функции нуклонов в ядре или, при дальнейшем упрощении, соответствующему двухнуклонному импульсному распределению ρ_{NN} . С точностью до такого приближения новые эксклюзивные эксперименты позволяют восстанавливать импульсные распределения нуклонов, а также исследовать изоспиновую зависимость КДК.

Двухнуклонное импульсное распределение в ядре ρ_{NN} зависит от относительного импульса нуклонов $\mathbf{k}$, импульса их центра масс $\mathbf{Q}$ и угла между этими векторами θ . Важным свойством таких распределений является их факторизация при высоких относительных импульсах k и малых импульсах центра масс Q , а также скейлинг для двухнуклонных (nn , pp и np) импульсных распределений в области высоких относительных импульсов. В серии работ К. Чиофи с соавт. (см., например, [8]) на основе микроскопических расчетов для систем A нуклонов показано, что импульсные распределения для ряда легких ядер (^3H , ^3He , ^4He , ^{12}C , ^{16}O , ^{40}Ca) при $Q < 1 - 1.5$ фм $^{-1}$ и $k > 1.5 - 2$ фм $^{-1}$ не зависят от угла θ и факторизуются следующим образом:

$$\rho_{NN}^A(\mathbf{k}, \mathbf{Q}) = \rho_{NN}^A(k, Q, \theta) \approx C_A \rho_{NN}(k) \rho_{CM}^A(Q), \quad (1)$$

где C_A – константа, зависящая от ядра A (так называемый ядерный контакт), $\rho_{CM}^A(Q)$ – распределение по импульсу центра масс пары нуклонов, а функция $\rho_{NN}(k)$ не зависит от ядра, т.е. является универсальным NN распределением. В случае триплетных np -пар это универсальное распределение совпадает с распределением нуклонов в дейтроне $\rho_{np}(k) = \rho_d(k)$.

Очевидно, что свойство факторизации двухнуклонного импульсного распределения предполагает существование аналогичного универсального распределения для спин-синглетных пар, т.е. pp - и nn -пар, а также спин-синглетных np -пар. Поскольку пара нуклонов не образует связанного синглетного состо-

¹⁾e-mail: rubtsova@nucl-th.sinp.msu.ru;
pomoran@nucl-th.sinp.msu.ru

яния, то возникает проблема получения такого универсального распределения для синглета в двухчастичном случае. Одно из возможных решений состоит в использовании волновой функции виртуального синглетного состояния, аппроксимацию которой можно построить в случае сепарабельного взаимодействия нуклонов [9]. Другой вариант, предлагаемый в рамках обобщенного контактного формализма (ОКФ) [10, 11], состоит в использовании функций рассеяния при нулевой энергии, нормированных интегралом по высокоимпульсной части, причем как в синглетном, так и в триплетном каналах. При этом в рамках ОКФ используются проинтегрированные по импульсу центра масс пары Q импульсные распределения (1) для ядер, которые также оказываются пропорциональными в высокоимпульсной части построенным двухчастичным универсальным распределениям как для триплетного канала, так и для синглетного. Отметим, что ОКФ широко используется в настоящее время для вычисления различных характеристик КДК в ядрах, а также для параметризации сечений электрорасщепления [12].

Данная работа посвящена детальному исследованию свойств распределений по относительному импульсу в связанных и несвязанных парах нуклонов, взаимодействующих в вакууме, а также разработке альтернативного метода их расчета. В соответствии с терминологией, используемой в работах по ОКФ [10, 11], такие распределения в области больших импульсов мы будем называть универсальными импульсными распределениями (УИР). Ниже мы покажем, что для построения таких распределений нет необходимости в решении задачи рассеяния строго при нулевой энергии, и можно рассматривать функции рассеяния при небольших энергиях, что расширяет диапазон методов, которые можно использовать для их вычисления. Кроме того, мы рассматриваем влияние ядерной среды на импульсные распределения в модели бесконечной ядерной материи. Также в этой работе вводится величина, позволяющая количественно сравнить вклады от высокоимпульсных частей функций в дискретном и непрерывном спектре, которая будет полезна для оценок соотношений между pp - и pn -корреляциями в ядрах для различных NN -взаимодействий.

В качестве техники для расчета универсальных функций мы используем метод пакетной дискретизации континуума (МПДК) [13, 14], подходящий для расчетов функций непрерывного спектра в свободном пространстве и в ядерной материи.

2. Метод построения универсальных импульсных распределений. Рассмотрим уравнение

Липпмана–Швингера для волновой функции двухнуклонной системы в импульсном представлении для определенного спина пары σ (мы используем единицы, в которых $\hbar = 1$):

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)\sigma}(\mathbf{k}) = \psi_{\mathbf{p}}^{0\sigma}(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' \frac{V^{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi_{\mathbf{p}}^{(+)\sigma}(\mathbf{k}')}{\frac{p^2}{m} + i0 - \frac{k'^2}{m}}, \quad (2)$$

где ψ^0 – функция свободного движения (плоская волна), V^{σ} – потенциал NN -взаимодействия, m – масса нуклона, и $p = \sqrt{mE}$ – относительный on-shell импульс, соответствующий энергии E . Ниже для удобства мы будем использовать индексы s и t для обозначения функций для синглетного 1S_0 и связанных триплетных каналов 3S_1 - 3D_1 соответственно, а также опустим верхний индекс (+) у волновой функции.

После разложения по парциальным волнам получим уравнения для парциальных компонент волновой функции. Для канала 1S_0 ($l = 0$ и $\sigma = 0$) такое уравнение имеет вид:

$$\psi_p^s(k) = \frac{\delta(k - p)}{k^2} + \int_0^{\infty} \frac{dk' (k')^2}{2\pi^2} \frac{V^s(k, k') \psi_p^s(k')}{\frac{p^2}{m} + i0 - \frac{k'^2}{m}}. \quad (3)$$

Эти функции нормированы согласно условию: $\int_0^{\infty} dk k^2 \psi_p^{*s}(k) \psi_p^s(k) = \frac{\delta(p - p')}{p^2}$, и имеют размерность, отличную от размерности функций дискретного спектра.

Определим высокоимпульсную часть интеграла от квадрата модуля такой волновой функции следующим образом:

$$a_2^s(p) = \int_{p_0}^{\infty} dk k^2 |\psi_p^s(k)|^2, \quad (4)$$

где p_0 определяет границу высокоимпульсной области. Отметим, что $a_2^s(p)$ – размерная величина и имеет размерность фм^3 .

В рамках ОКФ [11] УИР для nn - и pp -пар определяется через квадрат модуля волновой функции, полученной из решения уравнения (3) при $p = 0$ и нормированной на 1 в высокоимпульсной области. Рассмотрим такие распределения и при ненулевых p . Их можно получить из функций непрерывного спектра путем перенормировки:

$$\rho_p^s(k) \equiv \frac{|\psi_p^s(k)|^2}{a_2^s(p)}. \quad (5)$$

Заметим, что поскольку импульсное распределение определяется как квадрат модуля волновой функции, то не имеет значения, какому граничному условию удовлетворяет волновая функция.

Для вычисления волновых функций удобно использовать метод пакетной дискретизации континуума [13]. Суть этого метода состоит в разбиении импульсного пространства (в каждой парциальной волне) на непересекающиеся интервалы $\{\mathfrak{d}_i = [k_{i-1}, k_i]\}_{i=1}^N$ и введении базисных функций (свободных волновых пакетов), радиальные части которых имеют следующий вид:

$$x_i(k) = \frac{\theta(k \in \mathfrak{d}_i)}{k\sqrt{d_i}}, \quad d_i = k_i - k_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (6)$$

где θ -функция отлична от нуля и равна 1, если k принадлежит интервалу $\mathfrak{d}_i$.

В пакетном базисе волновая функция представляется в виде разложения $\psi_p^s(k) \approx \sum_{i=1}^N C_i x_i(k)$, а уравнение (3) сводится к системе алгебраических уравнений:

$$\sum_{i'=1}^N (\delta_{ii'} - g_{0i}(p)V_{ii'})C_{i'} = \delta_{ii0}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (7)$$

где $g_{0i}(p)$ – диагональные матричные элементы резольвенты свободного гамильтониана, $V_{ii'}$ – матричные элементы потенциала взаимодействия, а индекс i_0 определяет on-shell интервал, которому принадлежит p (см. детали в работе [13]). Таким образом, при проектировании в пакетный базис дельта-функция, входящая в неоднородный член уравнения (3), усредняется, а уравнение (7) в пакетном базисе не содержит сингулярностей.

3. Примеры импульсных NN -распределений для разных взаимодействий и их свойства. Рассмотрим импульсные NN -распределения (5), которые получаются из решения уравнения (7) при низких энергиях. В качестве границы высокоимпульсной области везде в этой работе будем использовать значение $p_0 = 1.4 \text{ фм}^{-1}$.

Такие распределения для канала 1S_0 , найденные для наймегенского NN -потенциала (тип II) [15], показаны на рис. 1. Как видно из этого рисунка, все распределения отличаются только при малых импульсах, причем функции имеют характерные всплески вблизи on-shell импульса p , отвечающие усредненной дельта-функции, входящей в решение. Однако в высокоимпульсной части, при $k > p_0$, все распределения совпадают.

Это свойство волновых функций становится очевидным, если рассмотреть уравнение Шредингера в импульсном представлении:

$$\frac{k^2 - p^2}{m} \psi_p^s(k) + \int_0^\infty \frac{dk'(k')^2}{2\pi^2} V^s(k, k') \psi_p^s(k') = 0. \quad (8)$$

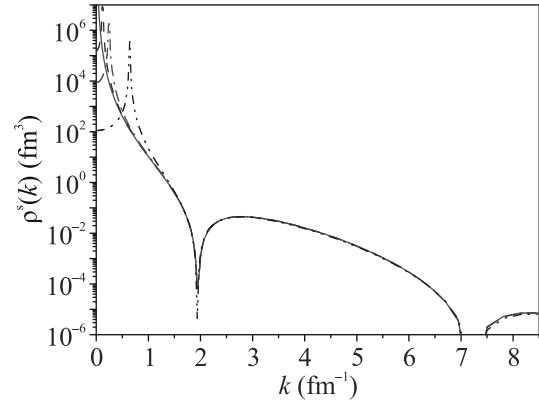


Рис. 1. (Цветной онлайн) Импульсные распределения в канале 1S_0 для наймегенского потенциала, построенные из функций континуума при разных энергиях: 0.0004 МэВ (сплошная кривая), 0.62 МэВ (штриховая кривая), 2.5 МэВ (штрих-пунктирная кривая), 17.15 МэВ (штрих-пунктир-пунктирная кривая)

Легко видеть, что решение этого уравнения в области $k \gg p$ практически не зависит от p . Поэтому при условии нормировки “на хвост” согласно (5), все функции с $p \ll p_0$ фактически совпадают друг с другом в высокоимпульсной области $k > p_0$. Это свойство можно записать в следующем виде:

$$|\psi_p^s(k)|^2 \approx a_2^s(p) \rho^s(k), \quad k \geq p_0, \quad p \ll p_0, \quad (9)$$

где высокоимпульсная часть распределения $\rho^s(k)$ не зависит от on-shell импульса p . Согласно свойству факторизации, двухнуклонные импульсные распределения в ядрах при больших импульсах k пропорциональны $\rho^s(k)$ [10].

Таким образом, для построения высокоимпульсных частей универсальных импульсных pp -распределений нет необходимости решать уравнение Липпмана–Швингера (или уравнение Шредингера) строго при нулевой энергии, достаточно выполнения условия $p \ll p_0$.

Вычислим УИР для четырех типов потенциалов: наймегенского (Nijm II) [15], боннского (CD Bonn) [16], а также двух вариантов дибарионной модели: Dib I [17] и Dib II [18]. В дибарионной модели предполагается возможность образования промежуточного шестикваркового состояния (дибариона) при сближении нуклонов. Это приводит к эффективному NN -взаимодействию, зависящему от энергии. Тем не менее, волновые функции для такой модели можно найти по той же схеме, что и для не зависящих от энергии потенциалов. Оба варианта модели, рассматриваемые в этой работе, позволяют воспроизвести амплитуды рассеяния для двух основных

NN -конфигураций, однако соответствующие волновые функции отличаются в области высоких импульсов.

На рисунке 2 приводятся импульсные распределения для NN -канала 1S_0 , полученные в пакет-

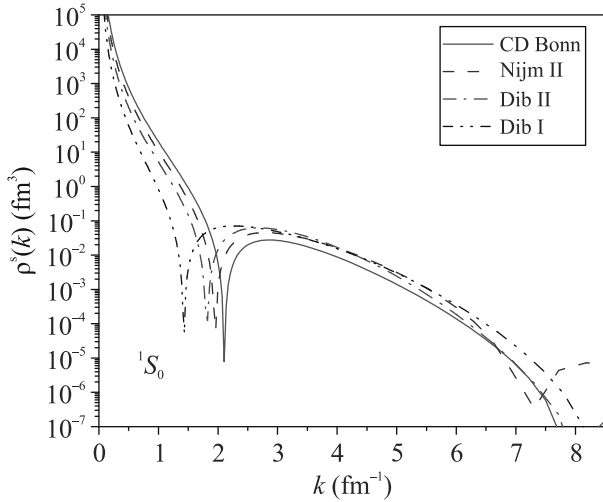


Рис. 2. (Цветной онлайн) Импульсные распределения в канале 1S_0 для разных NN -потенциалов

ном базисе для четырех рассмотренных потенциалов. Как видно из этого рисунка, различия рассматриваемых распределений в основном определяются положениями минимумов (т.е. нулей волновой функции). Первый минимум будет определять область минимума pp -корреляций в ядрах, т.е. область наблюдаемого доминирования np -корреляций над pp -корреляциями. Для самого “мягкого” боннского потенциала этот минимум смещен вправо, в то время как для дибарионной модели I он заметно смещен влево, в область более низких импульсов.

4. Импульсные распределения для спин-триплетного канала 3S_1 - 3D_1 . Следует отметить, что аналогичным свойством – совпадением высокоимпульсных частей при одинаковой нормировке функций – обладают и импульсные np -распределения для связанных каналов 3S_1 - 3D_1 . Здесь, однако, есть функция связанного состояния, для которой импульсное распределение вычисляется через квадрат модуля импульсной зависимости волновой функции дейтрона, $|\phi_d(k)|^2 \equiv |\phi_d^S(k)|^2 + |\phi_d^D(k)|^2$, следующим образом:

$$\rho^t(k) \equiv |\phi_d(k)|^2/a_2^d, \quad a_2^d = \int_{p_0}^{\infty} dk k^2 |\phi_d(k)|^2, \quad (10)$$

где a_2^d – безразмерная величина, определяющая вклад от высокоимпульсных компонент в импульсное распределение для дейтрона [19].

Построим также и УИР по функциям непрерывного спектра аналогично (5) с учетом вкладов S - и D -волновых компонент волновой функции. При этом функции a_2 будут определяться согласно:

$$a_2^{t,l}(p) \equiv \int_{p_0}^{\infty} dk k^2 |\psi_p^{t,l}(k)|^2, \quad l = 0, 2, \quad (11)$$

где квадрат модуля функции континуума состоит из суммы S - и D -компонент, а индекс l определяет канал с падающей волной²⁾.

Соответствующие функции для наймегенского потенциала приводятся на рис. 3 в сравнении с импульсным распределением для дейтрона, нормированным согласно (10). Поскольку в высокоимпульсной части все функции одинаковые, в качестве универсального np -распределения удобно использовать именно дейтронное.

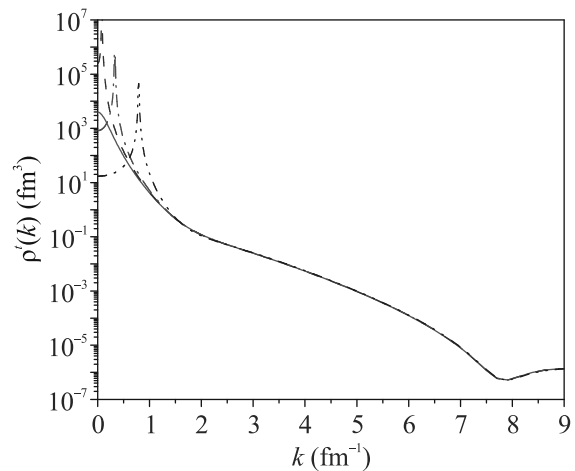


Рис. 3. (Цветной онлайн) Импульсные распределения в каналах 3SD_1 для наймегенского потенциала, построенные из функций при разных энергиях: –2.22 МэВ (сплошная кривая), 0.275 МэВ (штриховая кривая), 4.52 МэВ (штрих-пунктирная кривая), 25.96 МэВ (штрих-пунктир-пунктирная кривая)

На рисунке 4 приведены УИР для триплетных np -пар, т.е. для связанных каналов 3S_1 - 3D_1 , полученные из дейтронного импульсного распределения $|\phi_d(k)|^2$ для различных NN -потенциалов с условием нормировки (10).

Следует отметить, что в работах [20, 21] была доказана пропорциональность на малых расстояниях функций рассеяния (при низких энергиях) и функции связанного состояния в координатном пространстве для триплетного S -волнового взаимодействия на основе аналитического продолжения волновых

²⁾ Напомним, что при каждом p здесь есть два линейно независимых решения.

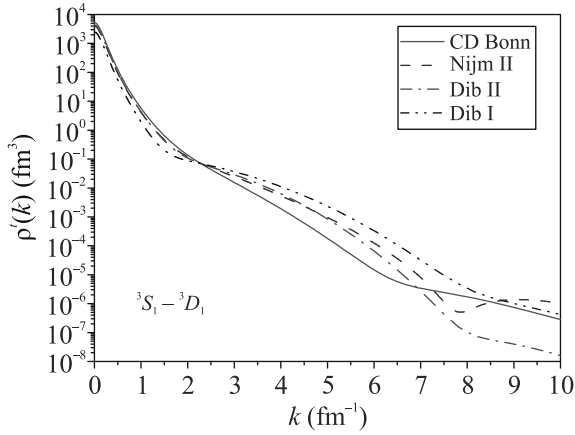


Рис. 4. (Цветной онлайн) Импульсные распределения в каналах 3SD_1 для разных NN -потенциалов

функций рассеяния в дейтронный полюс. По сути, это то же самое свойство, которое мы продемонстрировали в этой работе для высокоимпульсных частей импульсных распределений для триплетного канала, включающих S - и D -волновые компоненты для реалистических потенциалов NN -взаимодействия.

5. Сравнительные оценки высокоимпульсных вкладов. Величина a_2^d определяет долю высокоимпульсной части в полном импульсном распределении дейтрона. Значения этой величины заметно отличаются для разных моделей NN -взаимодействия [19]. Они равны: 0.032 – для боннского потенциала, 0.041 – для наймегенского потенциала, 0.039 – для дибарионного потенциала II, 0.068 для дибарионного потенциала I.

Возникает вопрос, как оценить доли высокоимпульсных компонент для функций рассеяния, и, в частности, для синглетного канала. Как было указано выше, величины $a_2(p)$, которые мы ввели для функций непрерывного спектра, являются размерными и их нельзя сопоставить напрямую с величинами a_2^d для связанного состояния. Однако можно рассмотреть суммарный (интегральный) вклад от высокоимпульсных компонент в каждом канале от состояний с on-shell импульсом, меньшим или равным некоторому значению q ($q \ll p_0$), через интегралы:

$$A_2^s(q) = \int_0^q dp p^2 a_2^s(p), \quad A_2^t(q) = \sum_{l=0,2} \int_0^q dp p^2 a_2^{t,l}(p). \quad (12)$$

Отношение таких интегральных величин в разных каналах (с учетом вклада от связанного состояния):

$$\eta(q) \equiv A_2^s(q) / (a_2^d + A_2^t(q)), \quad (13)$$

позволяет оценить соотношение высокоимпульсных компонент волновых функций для синглетного и

триплетного каналов при низких энергиях для рассматриваемого потенциала NN -взаимодействия.

Отношение $\eta(q)$ приводится на рис. 5 для рассмотренных четырех моделей NN -взаимодействия. Как видно из этого рисунка, это отношение между долями высокоимпульсных компонент для синглетного и триплетного каналов оказывается различным для разных потенциалов, т.е. является модельезависимым. При этом вклады от высокоимпульсных компонент для синглетного канала при малых энергиях существенно меньше, чем для триплетного ($\eta(q) \ll 1$) для всех рассмотренных взаимодействий. Также видно, что для потенциалов дибарионной модели относительные высокоимпульсные компоненты для функций синглетного канала больше, чем для традиционных мезон-обменных потенциалов. При этом, хотя универсальные функции для дибарионного потенциала II и для наймегенского потенциала для синглетного и триплетного каналов достаточно близки друг к другу (см. рис. 2 и 4) вплоть до импульсов порядка 7 fm^{-1} , отношение $\eta(q)$ для дибарионного потенциала оказывается заметно большим, что, скорее всего, приведет к более сильным pp -корреляциям в ядрах.

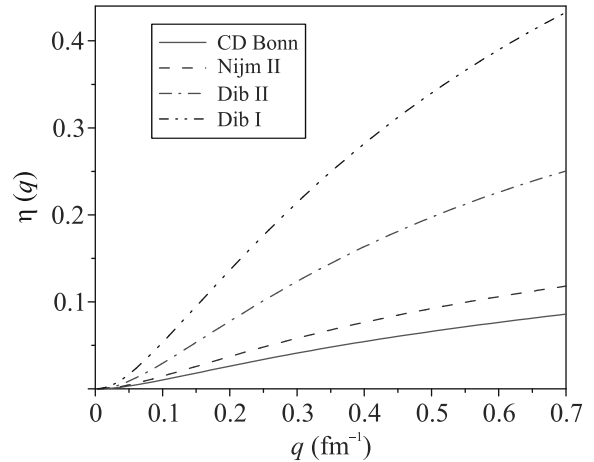


Рис. 5. (Цветной онлайн) Отношения $\eta(p)$ для синглетного и триплетного каналов для разных NN -потенциалов

Таким образом, предложенная величина $\eta(q)$ дополняет используемый в литературе параметр a_2^d для связанного состояния и позволяет сделать предварительную сравнительную оценку изоспиновой зависимости КДК для разных потенциалов NN -взаимодействия.

6. Импульсные распределения нуклонов в ядерной среде. В качестве еще одной иллюстрации рассмотрим высокоимпульсное поведение импульсных распределений в ядерной среде. Ранее бы-

ло показано [14], что можно определить эффективный гамильтониан для пары нуклонов, находящихся над поверхностью Ферми. В определенном диапазоне плотностей у такого гамильтониана возникают связанные состояния (состояния с энергиями ниже двойной энергии Ферми $2e_F$), причем как для триплетного, так и для синглетного каналов³⁾.

Исследуем далее высокимульсные компоненты волновых функций таких связанных состояний. В импульсном представлении волновая функция такого состояния в канале 1S_0 при нулевом импульсе центра масс удовлетворяет уравнению:

$$\frac{k^2 - k_B^2}{m} \psi_B^s(k) + \int_{k_F}^{\infty} \frac{dk' k'^2}{2\pi^2} V^s(k, k') \psi_B^s(k') = 0, \quad (14)$$

где k_F – импульс Ферми для рассматриваемой среды, а уравнение решается в подпространстве $k, k' \geq k_F$ (так называемом Паули-разрешенном подпространстве). При этом энергия связанного состояния отрицательна и определяется из соотношения $E_B = -\frac{k_B^2}{m} - 2e_F$, где $e_F = \frac{k_F^2}{2m}$.

В работе [14] описан метод расчета таких состояний в том же пакетном базисе, который мы использовали выше. Эти функции нормированы на единицу, поэтому для их нормировки на высокимульсную часть можно ввести безразмерные множители $a_2^{s,t}$. На рисунке 6 представлены импульсные распределения для связанных состояний двух нуклонов в ядерной среде в синглетном и триплетном каналах при импульсе Ферми $k_F = 0.6 \text{ фм}^{-1}$ для боннского потенциала в сравнении с УИР для того же взаимодействия, полученными выше. В высокимульсных частях сравниваемые функции практически неотличимы, что подтверждает универсальность двухнуклонных КДК. Полученные доли высокимульсных компонент для синглетной и триплетной функций составляют $a_2^s = 0.0018$ и $a_2^t = 0.041$ соответственно. Несмотря на то, что синглетные нуклоны здесь связаны, снова наблюдается значительное превышение вклада высокимульсной компоненты для триплетного канала по сравнению с синглетным.

Мы нашли также доли высокимульсных компонент для двух других взаимодействий, рассматриваемых в этой работе. Отношения a_2^s/a_2^t при $k_F = 0.6 \text{ фм}^{-1}$ для разных NN -потенциалов получают следующие: 0.044 (CD Bonn), 0.058 (Nijm II), 0.142 (Dib II). Как мы видим, эти отношения располагаются в той же последовательности, что и кривые $\eta(q)$,

³⁾Такие состояния отвечают собственным функциям ядра уравнения Бете–Голдстоуна с единичными собственными значениями.

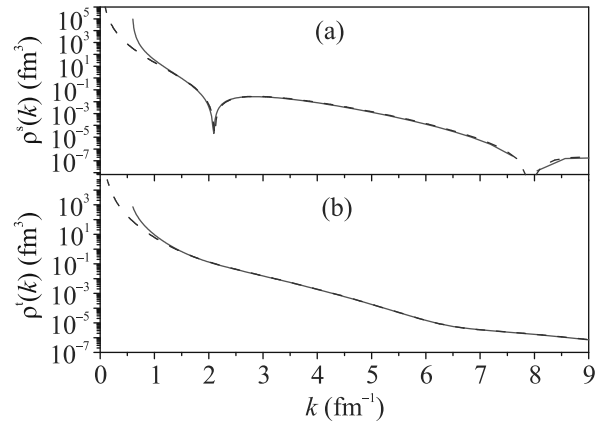


Рис. 6. (Цветной онлайн) Импульсные распределения в каналах 1S_0 (a) и 3S_1 - 3D_1 (b), найденные при расчетах в ядерной среде на основе уравнения (14) для боннского потенциала (сплошные кривые) в сравнении с УИР для того же потенциала (штриховые кривые)

приведенные на рис. 5 для NN -взаимодействий в вакууме.

7. Заключение. Показано, что при выбранном условии нормировки на высокимульсную часть в качестве универсальных импульсных распределений можно использовать двухчастичные волновые функции рассеяния при любой достаточно малой энергии. Это свойство открывает широкие возможности для вычисления таких распределений. В этой работе был использован МПДК, однако здесь можно использовать и любые другие подходы, которые традиционно применяются для вычисления функций непрерывного спектра. В частности, для построения универсальных распределений можно использовать и псевдосостояния гамильтониана, полученные в L^2 базисе, если базис позволяет описать область высоких импульсов. Такое исследование мы планируем в будущем.

Также в работе предложена функция $\eta(q)$, позволяющая сравнить вклады высокимульсных компонент для спин-синглетного и спин-триплетного каналов при низких энергиях. Такая функция зависит от используемой модели NN -взаимодействия и может служить дополнительной характеристикой изоспиновой зависимости КДК.

Кроме того, мы исследовали импульсные распределения, отвечающие связанным состояниям коррелированных пар нуклонов выше поверхности Ферми в ядерной среде. Показано, что импульсные распределения для таких состояний в области больших импульсов пропорциональны универсальным NN -распределениям.

Финансирование работы. Работа выполнена за счет средств гранта Российского научного фонда # 23-22-00072, <https://rscf.ru/project/23-22-00072/>.

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

1. C. Ciofi degli Atti, Phys. Rep. **590**, 1 (2015).
2. J. Arrington, N. Fomin, and A. Schmidt, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **72**, 307 (2022).
3. M. Duer, O. Hen, E. Piasetzky et al. (CLAS Collaboration), Nature **560**, 617 (2018).
4. S. Li, R. Cruz-Torres, N. Santiesteban et al. (Collaboration), Nature **609**, 41 (2022).
5. R. Cruz-Torres, D. Nguyen, F. Hauenstein et al. (Jlab Hall A Tritium Collaboration), Phys. Rev. Lett. **124**, 212501 (2020).
6. M. Patsyuk, J. Kahlbow, G. Laskaris et al. (The BM@N Collaboration), Nat. Phys. **17**, 693 (2021).
7. A. B. Larionov and Yu. N. Uzikov, Phys. Rev. C **109**, 064601 (2024).
8. M. Alvioli, C. Ciofi degli Atti, and H. Morita, Phys. Rev. C **94**, 044309 (2016).
9. Yu. N. Uzikov and A. Uvarov, Phys. Part. Nucl. **53**, 426 (2022).
10. R. Cruz-Torres, D. Londeroni, R. Weiss, M. Piarulli, N. Barnea, D. W. Higinbotham, E. Piasetzky, A. Schmidt, L. B. Weinstein, R. B. Wiringa, and O. Hen, Nat. Phys. **17**, 306 (2021).
11. R. Weiss, R. Cruz-Torres, N. Barnea, E. Piasetzky, and O. Hen, Phys. Lett. B **780**, 211 (2018).
12. R. Weiss, A. W. Denniston, J. R. Pybus, O. Hen, E. Piasetzky, A. Schmidt, L. B. Weinstein, and N. Barnea, Phys. Rev. C **103**, L031301 (2021).
13. O. A. Rubtsova, V. I. Kukulin, and V. N. Pomerantsev, Ann. Phys. **360**, 613 (2015).
14. H. Mütter, O. A. Rubtsova, V. I. Kukulin, and V. N. Pomerantsev, Phys. Rev. C **94**, 024328 (2016).
15. V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, and J. J. de Swart, Phys. Rev. C **49**, 2950 (1994).
16. R. Machleidt, Phys. Rev. C **63**, 024001 (2001).
17. V. I. Kukulin, I. T. Obukhovskiy, V. N. Pomerantsev, and A. Faessler, Int. J. Mod. Phys. E **11**, 1 (2002).
18. V. I. Kukulin, V. N. Pomerantsev, O. A. Rubtsova, M. N. Platonova, and I. T. Obukhovskiy, Chin. Phys. C **46**, 114106 (2022).
19. F. Sammarruca, Phys. Rev. C **92**, 044003 (2015).
20. G. Fäldt and C. Wilkin, Phys. Lett. B **382**, 209 (1996).
21. G. Fäldt and C. Wilkin, Am. J. Phys. **66**, 876 (1998).

Ограничение на относительную вероятность распада

$$K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$$

А. В. Артамонов^a, В. Н. Бычков^c, С. В. Донсков^a, А. П. Филин^a, С. Н. Филиппов^b, А. М. Горин^a, Е. Н. Гущин^b,
А. В. Инякин^a, Г. Д. Кекелидзе^c, Г. В. Хаустов^a, С. А. Холоденко^{a,d}, А. А. Худяков^b, В. Н. Колосов^a,
А. К. Конопляников^a, В. И. Кравцов^b, Ю. Г. Куденко^{b,e,f}, А. В. Кулик^{b,1)}, В. Ф. Куршцов^a, В. А. Лишин^a,
В. М. Лысан^c, М. В. Медынский^a, В. Ф. Образцов^a, А. В. Охотников^a, В. А. Поляков^a, А. Ю. Поляруш^b,
В. И. Романовский^a, В. И. Рыкалин^a, А. С. Садовский^a, В. Д. Самойленко^a, М. М. Шапкин^a, И. С. Тюрин^a,
В. А. Уваров^a, О. П. Ющенко^a, Б. Ж. Залиханов^c

^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт” – ИФВЭ, 142281 Протвино, Россия

^bИнститут ядерных исследований – РАН, 117312 Москва, Россия

^cОбъединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

^dIstituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Pisa, 3-56127 Pisa, Italy

^eМосковский физико-технический институт (МФТИ), 141701 Долгопрудный, Москва

^fНациональный исследовательский ядерный университет (МИФИ), 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 июля 2024 г.

После переработки 11 сентября 2024 г.

Принята к публикации 11 сентября 2024 г.

Сотрудничеством ОКА предпринят поиск распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ на статистике 3.65×10^9 распадов K^+ . Распад не обнаружен. Поставленное ограничение $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu) < 5.4 \times 10^{-8}$ 90 % CL в 65 раз лучше приведенного в таблице частиц.

DOI: 10.31857/S0370274X24100145, EDN: SNDTWF

1. Введение. Редкий распад $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ (Ke5) до настоящего времени не наблюдался. Из-за ограниченного фазового объема Киральная Пертурбативная Теория (ChPT) предсказывает очень малую величину относительной вероятности $\text{BR}(\text{Ke5})$, $10^{-11} - 10^{-12}$ [1–3]. С другой стороны, можно ожидать, что ограниченный фазовый объем усиливает роль $\pi\pi$ -рассеяния в конечном состоянии, что может существенно увеличить BR. Например, может образоваться пионный атом, *пионий* ($A_{2\pi}$), с последующим распадом на $\pi^0 \pi^0$: $\pi^+ \pi^- \rightarrow A_{2\pi} \rightarrow \pi^0 \pi^0$ [4, 5]. Так как распадная длина пиония $\sigma\tau \sim 10^{-4}$ см намного превосходит ядерный масштаб, то в этом случае имеет место распад на 4 частицы, $K^+ \rightarrow A_{2\pi} \pi^0 e^+ \nu$, а не на 5. Это обстоятельство увеличивает фазовый объем в $\sim 10^6$ раз [2, 3], а последующий распад $A_{2\pi} \rightarrow \pi^0 \pi^0$, идущий с вероятностью $\approx 100\%$, приводит к конечному состоянию $\pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$.

Наше исследование проведено с целью существенного улучшения текущего ограничения на вероятность этого распада: $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu) < 3.5 \times 10^{-6}$ [6]. Ограничение получено путем нормировки

на события распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ (Ke3), а контроль систематики – путем измерения брэнчинга распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ (Ke4).

2. Данные и процедура обработки. Эксперимент ОКА, расположенный в НИЦ “Курчатовский Институт” – ИФВЭ в Протвино (Россия), посвящен изучению распадов каонов на лету. Обогащенный каонами вторичный пучок получен путем высокочастотной (ВЧ) сепарации по схеме Панофского. Импульс пучка 17.7 ГэВ с содержанием каонов 12.5 % и интенсивностью до 5×10^5 каонов за цикл ускорителя У-70. Установка ОКА имеет два магнитных спектрометра, пучковый и вторичных частиц, а также 11-метровый распадный объем, окруженный охранной системой. Установка содержит также электромагнитные калориметры GAMS и BGD [7, 8], адронный калориметр GDA [9] и систему идентификации мюонов. Два черенковских счетчика служат для выделения K^+ в пучке на фоне p, π^+ , а широкоапертурный 4-канальный поровый черенковский счетчик – для выделения вторичных $e^\pm$ на фоне $\mu^\pm, \pi^\pm$. Более подробно с установкой можно ознакомиться по ссылкам [10, 11]. Для поиска распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ использованы данные, записанные в сеансах 2012,

¹⁾e-mail: alex.kulik@gmail.com

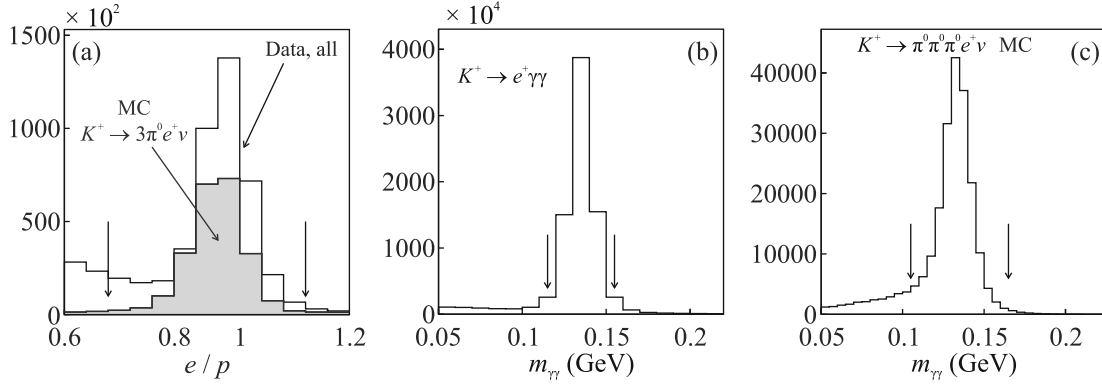


Рис. 1. (Цветной онлайн) Идентификация электрона и поиск π^0 . (а) – Идентификация электрона. Отношение e/p : данные (светлая гистограмма) и МК $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ (заштрихованная). (б) – Масса $\gamma\gamma$ в распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ (данные); стрелками показаны жесткие отборы (с) – Масса $\gamma\gamma$ в распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ (МК); стрелками показаны мягкие отборы

2013 и 2018 гг. Для расчета эффективностей регистрации методом Монте-Карло (МК) сгенерированы события распадов Ке3, Ке4 и Ке5 при помощи программы Geant-3.21 [12] с детальным описанием установки. МК событий сгенерировано примерно в 10 раз больше, чем реальных событий, записанных в ходе эксперимента. Для оценки фонов сгенерированы МК события 6-ти наиболее интенсивных распадов заряженного каона ($\mu^+ \nu$, $\pi^+ \pi^0$, $\pi^0 e^+ \nu$, $\pi^0 \mu^+ \nu$, $\pi^+ \pi^0 \pi^0$, $\pi^+ \pi^+ \pi^-$) в количествах, пропорциональных вероятностям этих распадов. События МК обработаны так же, как и данные, включая реконструкцию. Каждому МК событию приписан вес $w \sim |M|^2$, где M – матричный элемент распада.

3. Отбор событий Ке3, Ке4, Ке5. Отбираются события с единственным вторичным треком, идентифицированным как e^+ и с 1, 2 или 3 π^0 -мезонами. Для этого требуется, чтобы положительному треку соответствовал ливень в GAMS с отношением e/p в пределах $\pm 3\sigma$ от номинального значения (рис. 1а). Из всех возможных комбинаций γ -квантов выбирается комбинация с наибольшим числом пар (π^0 -мезонов), удовлетворяющих условию

$$\sum_i (m_{\gamma\gamma} - m_{\pi^0})_i^2 < R_\pi^2. \quad (1)$$

Значение параметра R_π будет конкретизировано ниже.

Эта общая процедура применена к трем распадам с некоторыми вариациями. Большая статистика в $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ и $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ позволяет ужесточить отборы для большего подавления фонов. Прямо противоположная ситуация возникла с распадом $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$: ни событий, ни фона не видно даже при более мягких отборах, что позволяет увеличить эффективность и повысить устойчивость к

возможным неточностям МК моделирования. Поэтому мы используем 2 набора критериев: “жесткие” – для $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ и “мягкие” – для поиска редкого распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$. Такой парадоксальный выбор обусловлен отсутствием фона для $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$. Распад $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ регистрируется как с мягкими, так и с жесткими отборами для нормировки $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ и $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ соответственно. Ниже перечислены различия между мягкими и жесткими отборами.

- Идентификация электрона. Жесткие отборы основаны исключительно на GAMS: проекция трека в GAMS должна попадать в один из ливней, как было указано выше. В мягких отборах принимаются треки без соответствующего ливня в GAMS, если широкоапертурный черенковский счетчик подтверждает электрон. Это послабление заметно поднимает эффективность, так как в распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ с мягким спектром e^+ треки часто не попадают в GAMS.
- Поиск π^0 . Параметр R_π в (1) $R_\pi = 0.02$ ГэВ в жестких отборах и $R_\pi = 0.03$ ГэВ в мягких (рис. 1б, с).
- Жесткие отборы требуют 2 или 4 γ с $E_\gamma > 0.5$ ГэВ для поиска π^0 согласно (1). Мягкие отборы ищут π^0 в событиях с $n_\gamma \geq 6$, $E_\gamma > 0.3$ ГэВ и иногда находят $3\pi^0$ в событиях с 7γ или 8γ .
- Жесткие отборы бракует события с ливнями в адронном калориметре GDA и требуют ровно 2 сегмента e^+ трека: один – до анализирующего магнита и один – после. Мягкие отборы допускают ливни в GDA и лишние сегменты трека.

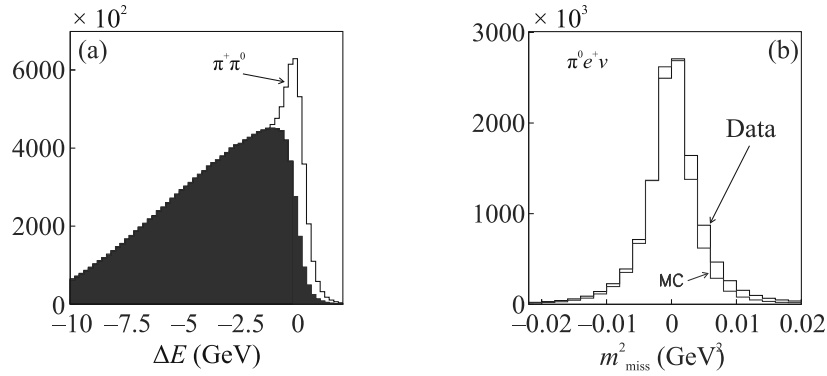


Рис. 2. (Цветной онлайн) Наблюдение распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$. (a) – Баланс энергии, отбор $\Delta E < -1$ ГэВ введен для подавления фона $\pi^+ \pi^0$. (b) – Недостающая масса, данные и МК

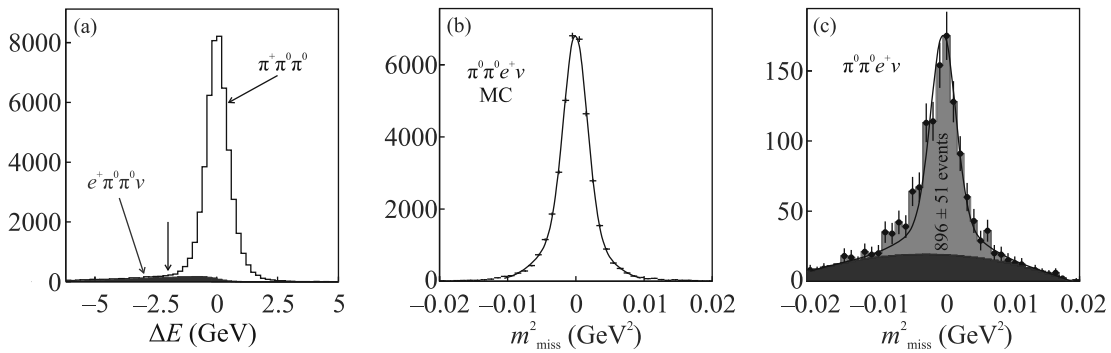


Рис. 3. (Цветной онлайн) Наблюдение распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$. (a) – Баланс энергии в событии: сигнал (синяя гистограмма) и фон (светлая). (b) – Фит модельного (МК) спектра недостающей массы двумя функциями Гаусса. (c) – Фит реального спектра недостающей массы формой МК с рис. 3b + полином 2 степени

4. Наблюдение распадов. При окончательном отборе событий введены дополнительные критерии, специфические для каждого распада.

4.1. $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$. Баланс энергии в событии определен как $\Delta E = E_{\text{det}} - E_b$, где E_{det} – сумма энергий зарегистрированных частиц (e^+ , π^0), а E_b – энергия K^+ пучка. Мы ожидаем, что распады с ν будут обнаруживать дефицит баланса $\Delta E < 0$, так как ν не регистрируется. Потребовав дополнительно к мягким отборам $\Delta E < -1$ ГэВ (рис. 2a) для подавления фона $\pi^+ \pi^0$, мы видим чистый пик в недостающей массе, содержащий $\sim 8.4 \times 10^6$ событий (рис. 2b). Фон в этой выборке оценивается МК на уровне $\sim 1\%$.

4.2. $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$. Для подавления доминирующего фона $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^0$ введены отборы по балансу энергии $\Delta E < -2$ ГэВ (рис. 3a) и поперечному импульсу $P_T < 0.12$ ГэВ. Отбор по недостающей энергии E_{miss}^* в системе покоя K^+ также подавляет фоны. Порог $E_{\text{miss}}^* > 0$ выбран потому, что в распадах с участием ν при хорошей точности измерения $E_{\text{miss}}^* \approx E_\nu^* > 0$. МК моделирование показывает, что события с отрицательными E_{miss}^* возникают преим-

ущественно из-за ошибочной идентификации пары $\gamma\gamma$ как π^0 ; некоторый вклад дает также конечное разрешение. Пик в недостающей массе ясно виден на рис. 3с. Мы фитируем этот спектр формой, полученной фитом соответствующего спектра МК на рис. 3b + полином 2 степени для описания фона. Интеграл МК формы дает 896 ± 51 событий распада.

4.3. $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$. Вычислены недостающая энергия E_{miss}^* и недостающий импульс p_{miss}^* в системе покоя K^+ ; они не всегда совпадают друг с другом, так как оставлена свободной недостающая масса. Большинство кандидатов не удовлетворяют естественному требованию $E_{\text{miss}}^* > 0$ (рис. 4). Несколько оставшихся кандидатов забракованы требованием $|p_{\text{miss}}| < 0.08$ ГэВ, обусловленным кинематикой распада: импульс ν не превышает $p_\nu < \frac{M_K^2 - (3m_\pi)^2}{2M_K} \approx 0.08$ ГэВ. Как видно из рис. 4, кандидаты ни в коей мере не соответствуют МК моделированию.

5. Относительные вероятности. Эффективности регистрации вычислены как отношение числа прошедших отборы МК событий к полному числу сгенерированных событий. Полученная таким об-

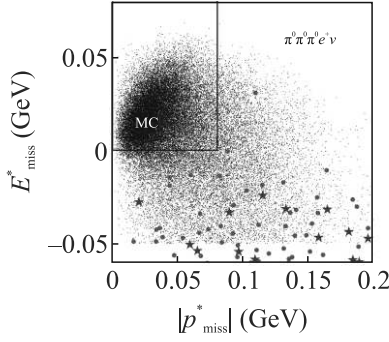


Рис. 4. (Цветной онлайн) Поиск распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$: модуль недостающего импульса и недостающая энергия в системе покоя K^+ , данные (красные точки), МК фон (синие звездочки) и МК сигнал (мелкие точки). Ни одно событие не проходит отборов, показанных прямоугольником

разом эффективность регистрации распада x , $\epsilon(x)$, число зарегистрированных в эксперименте событий n_x и табличное значение $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu) = (5.07 \pm \pm 0.04)\%$ использованы для получения относительных вероятностей:

$$\text{BR}(x) = \frac{n_x}{n_{\pi^0 e^+ \nu}} \times \frac{\epsilon_{\pi^0 e^+ \nu}}{\epsilon_x} \times \text{BR}(\pi^0 e^+ \nu), \quad (2)$$

$x = \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$, $\pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$, $n_{\pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu} < 2.3$ для 90 %CL.

Матричные элементы распадов вычислены в рамках Стандартной Модели:

$$M \sim (\bar{e} \gamma_\alpha (1 + \gamma_5) \nu) H_\alpha. \quad (3)$$

Лоренц-инвариантность, Бозе-статистика и малость массы электрона ограничивают адронный ток H_α следующими формами:

$$\begin{aligned} H_\alpha &= f_1 p_\alpha \quad \text{для} \quad K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu, \\ H_\alpha &= f_1 (p_1 + p_2)_\alpha \quad \text{для} \quad K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu, \\ H_\alpha &= f_1 (p_1 + p_2 + p_3)_\alpha + f_4 q_\alpha, \\ q &= \frac{\{p_1 \cdot p_2\} p_3}{m_\pi^2} \quad \text{для} \quad K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь p_i – импульсы пионов, а $\{\}$ – симметризация по трем π^0 . $f_{1,4}(m_{e\nu}, m_h)$ – форм-факторы, в общем случае зависящие от масс лептонной и адронной систем: $m_{e\nu}^2 = (k_e + k_\nu)^2$, $m_h^2 = (\sum_i p_i)^2$. Мы взяли феноменологическую параметризацию для f_1 из [13]; она мало влияет на эффективность. Мы не располагаем информацией по f_4 , однако МК моделирование показывает небольшое влияние f_4 на эффективность регистрации (до 9 %, рис. 5). Мы приводим результат для наихудшего случая $f_4 = -3f_1$. Относительные вероятности приведены в табл. 1.

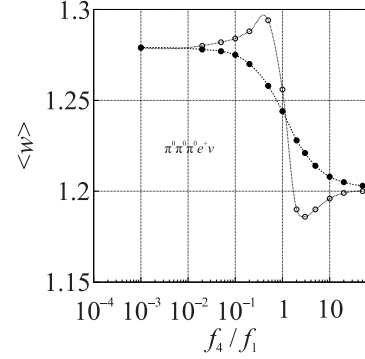


Рис. 5. Средний вес $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ событий, прошедших все отборы в зависимости от f_4/f_1 , светлые кружочки – $f_4 < 0$

6. Систематические ошибки. Наибольшая неопределенность, до 9 %, возникает из-за неизвестного отношения f_4/f_1 . Мы приводим верхний предел в самом пессимистическом предположении $f_4 = -3f_1$, он понизится до $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu) < 5 \times 10^{-8}$ 90 %CL, если $f_4 \ll f_1$ (рис. 5). Отсутствие фона для распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ позволило применить предельно мягкие отборы, сделав расчет эффективности малочувствительным к возможным неточностям МК модели.

Согласие полученного $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu)$ с мировым средним доказывает, что ошибки в расчете эффективностей $\epsilon_{\pi^0 e^+ \nu}, \epsilon_{\pi^0 \pi^0 e^+ \nu}$ не превышают ошибки в измерении $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu)$ $51/896 \approx \approx 6\%$. Влияние такой неопределенности на верхний предел BR ничтожно. Если мы хотим поставить ограничение на некоторую величину B , связанную с наблюдаемым числом событий n соотношением $n = \epsilon B$ и ϵ известна с ошибкой $\pm \sigma_\epsilon$ [14], то при нормальном распределении ϵ вероятность выпадения $n = 0$ дается сверткой:

$$P_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\epsilon} \int \exp \left[-(\epsilon + x)B - \frac{x^2}{2\sigma_\epsilon^2} \right] dx.$$

В результате интегрирования получаем

$$P_0 = e^{-A}, \quad A = \epsilon B \left[1 - \left(\frac{\sigma_\epsilon}{\epsilon} \right)^2 \times \frac{\epsilon B}{2} \right].$$

Для 90 % CL $P_0 = 0.1$, $A \approx 2.3$. Отсюда имеем $\epsilon B \approx 2.3 \left[1 + 1.15 \left(\frac{\sigma_\epsilon}{\epsilon} \right)^2 \right] \left(\frac{\sigma_\epsilon}{\epsilon} \ll 1 \right)$.

Таким образом, поправка к верхнему пределу лишь квадратична по $(\sigma_\epsilon/\epsilon)$, т.е. пренебрежимо мала при любой разумной оценке ϵ .

7. Заключение. В рамках сотрудничества ОКА изучались 3 распада: $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$, $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$

Таблица 1. Вычисление вероятностей распадов

Распад	Число событий	Эффективность	BR, настоящая работа	BR, PDG
$K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ Жесткие отборы	8.4×10^6	1.08×10^{-2}	Нормировка	$(5.07 \pm 0.04) \%$
$K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$	896 ± 51	2.3×10^{-3}	$(2.54 \pm 0.14) \times 10^{-5}$	$(2.55 \pm 0.04) \times 10^{-5}$
$K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$	0	1.89×10^{-3}	$< 5.4 \times 10^{-8} \text{ 90 \% CL}$	$< 3.5 \times 10^{-6} \text{ 90 \% CL}$

и $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$, первый из которых использован для абсолютной нормировки результатов. Полученная величина $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 e^+ \nu) = (2.54 \pm 0.14) \times 10^{-5}$ согласуется с мировым средним в пределах статистических ошибок. Распад $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$ не обнаружен. Установлен верхний предел $\text{BR}(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu) < 5.4 \times 10^{-8} \text{ 90 \% CL}$ – в 65 раз ниже опубликованного в настоящее время. Из-за неопределенности в матричном элементе верхний предел приведен в наихудшем предположении, он может быть еще на 9 % ниже. Важный результат настоящей работы – отсутствие фона к этому распаду, что позволяет улучшать ограничение линейно (а не как квадратный корень) с объемом доступного статистического материала. Это обстоятельство открывает большие возможности для будущих экспериментов с высокой статистикой.

Мы благодарим наших коллег из ускорительного отдела за хорошую работу У-70 во время набора данных; коллег из отдела пучков – за устойчивую работу канала 21К, включая работу ВЧ-дефлекторов, и коллег из инженерно-физического отдела – за бесперебойную работу криогенной системы ВЧ-дефлекторов.

Финансирование работы. Работа выполнена в Институте физики высоких энергий им. А. А. Логунова Национального исследовательского центра “Курчатовский институт” при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 22-12-0051).

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

1. В. С. Демидов, Е. П. Шебалин, Препринт ИТЭФ-31 (1991).
2. J. Bijnens, G. Colangelo, G. Ecker, and J. Gasser, arXiv:hep-ph/9411311v1 16Nov 1994.
3. S. Blaser, Phys. Lett. B **345**, 287 (1995).
4. J. Uretsky and J. Palfrey, Phys. Rev. **121**, 1798 (1961).
5. B. Adeva, L. Afanasyev, M. Benayoun et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **704**, 24 (2011).
6. В. Н. Болотов, С. Н. Гниненко, Р. М. Джилкибаев, В. В. Исаков, Ю. М. Клубаков, В. Д. Лаптев, В. М. Лобашев, В. Н. Марин, А. А. Поглауев, В. Е. Постоев, А. Н. Торопив, Письма в ЖЭТФ **47**, 8 (1988).
7. B. Powell, R. Heller, N. Ibold et al. (Collaboration), Nucl. Instrum. Meth. **198**, 217 (1982).
8. F. G. Binon, V. M. Buyanov, S. V. Donskov et al. (Collaboration), Nucl. Instrum. Meth. A **248**, 86 (1986).
9. Ф. Бинон, К. Брикман, В. М. Буянов и др. (Collaboration), Препринт ИФВЭ-86-109 (1986).
10. V. F. Kurshetsov, PoS KAON09 **051** (2009).
11. A. S. Sadovsky, V. F. Kurshetsov, A. P. Filin et al. (Collaboration), Eur. Phys. J. C **78**, 92 (2018).
12. R. Brun, F. Bruyant, F. Carminati, S. Giani, M. Maire, A. McPherson, G. Patrick, and L. Urban, CERN Program Library; W5013 (1993); DOI:10.17181/CERN.MUH (1993).
13. J. R. Batley, G. Kalmus, C. Lazzeroni et al. (Collaboration), JHEP **08**, 159 (2014); ArXiv ePrint: 1406.4749.
14. B. Roger, arXiv:hep-ex/0207026v1 6 Jul 2002.

Генерация второй гармоники, сопровождаемая формированием высокоинтенсивных световых пуль

С. В. Сазонов¹⁾

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

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

Поступила в редакцию 27 апреля 2024 г.

После переработки 31 августа 2024 г.

Принята к публикации 16 сентября 2024 г.

Аналитически исследована возможность формирования двухчастотной световой пули в режиме генерации второй гармоники при учете фокусирующей керровской нелинейности. Показано, что в условиях реализации фазового и группового синхронизмов и отсутствия дисперсии групповой скорости на частоте второй гармоники устойчивая световая пуля может сформироваться при ограничении сверху на ее интенсивность, а также ограничениях снизу на временную длительность и апертуру.

DOI: 10.31857/S0370274X24100154, EDN: LZGUPX

1. Введение. Генерация второй гармоники с помощью непрерывного лазерного излучения может сопровождаться формированием двухчастотных пространственных солитонов – пучков, ограниченных в поперечных направлениях [1, 2].

Одной из тенденций развития современной нелинейной оптики и лазерной физики является создание в лабораторных условиях световых импульсов все более коротких длительностей и высоких интенсивностей [3, 4]. Благодаря данному обстоятельству подвергаются модификации теоретические подходы, хорошо зарекомендовавшие себя в оптике импульсов умеренных интенсивностей.

Импульсные режимы генерации второй гармоники обычно описываются при учете только квадратичной нелинейности. С другой стороны, понятно, что с увеличением интенсивности оптических импульсов все большее влияние на данные процессы способна оказывать кубическая (керровская) нелинейность.

Представляет немалый интерес исследование процессов, при которых могут сформироваться устойчивые локализованные во всех направлениях пространственно-временные солитоны (световые пули).

Известно, что одна только фокусирующая керровская нелинейность в однородной среде не способна привести к формированию световой пули [5, 6]. Если мощность оптического импульса превышает определенное критическое значение, наблюдается самофокусировка (коллапс) сигнала. В противном слу-

чае преобладает дифракционное уширение импульса, что приводит к его дефокусировке. Такие же выводы справедливы для керровской нелинейности в режиме генерации третьей гармоники [7]. Заметим, что в фокусирующих градиентных волноводах могут быть созданы условия формирования световых пуль при керровской нелинейности [8–14].

Сценарии импульсных режимов генерации второй гармоники в значительной степени определяются характером дисперсии групповой скорости (ДГС) на основной частоте [15–20]. Здесь для формирования световых пуль ДГС должна быть аномальной.

В однородных средах с квадратичной нелинейностью самофокусировки не происходит. Данная нелинейность вкупе с дифракцией и аномальной ДГС приводит к формированию двухчастотных световых пуль [15, 20].

В работах [21] и [22] исследовано влияние соответственно дефокусирующей и фокусирующей керровских нелинейностей на импульсный режим генерации второй гармоники. В средах с дефокусирующей керровской нелинейностью возможно формирование двухчастотных вихревых световых пуль, которые устойчивы, если их энергия превышает определенное критическое значение [21]. В случае фокусирующей керровской нелинейности при удовлетворении условиям фазового и группового синхронизмов энергия безвихревых двухчастотных световых пуль не может превышать определенное критическое значение [22]. В [23] рассмотрена возможность формирования двухчастотных световых пуль при собственных и перекрестных керровских нелинейностях про-

¹⁾e-mail: sazonov.sergey@gmail.com

твояположных знаков. Также определены области устойчивости таких пуль в пространстве параметров исследуемой системы.

Из сказанного выше четко видны конкурирующие влияния квадратичной и керровской нелинейностей на возможность формирования световых пуль в режиме генерации второй гармоники. Здесь деструктивная роль фокусирующей керровской нелинейности приводит к некоторым ограничениям на параметры оптических импульсов, при которых еще способны формироваться двухчастотные световые пули в однородной среде.

В [21–23] ДГС предполагалась аномальной как на основной частоте, так и на частоте второй гармоники. В то же время представляют интерес ситуации, когда характер ДГС различен для разных частот. Отдельного внимания заслуживает случай, когда ДГС на частоте второй гармоники равна нулю [1, 24]. Здесь при аномальной ДГС на основной частоте и учете только квадратичной нелинейности возможно формирование двухчастотных световых пуль [24]. В то же время, как было сказано выше, для высокоинтенсивных сигналов может оказаться существенной деструктивная роль керровской нелинейности.

Настоящая работа посвящена аналитическому исследованию влияния фокусирующей керровской нелинейности на возможность формирования двухчастотных световых пуль при нулевой ДГС на частоте второй гармоники.

2. Основные уравнения. Будем считать, что поляризованные в одной плоскости импульсы на основной частоте и частоте второй гармоники распространяются вдоль оси z . При этом выполнены условия фазового и группового синхронизмов, а ДГС на частоте второй гармоники равна нулю. В этом случае для медленно меняющихся амплитуд (ММА) ψ_1 и ψ_2 электрического поля импульса на основной частоте ω и на второй гармонике 2ω соответственно в параксиальном приближении имеем систему уравнений

$$i\frac{\partial\psi_1}{\partial z} + \frac{\beta}{2}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial\tau^2} - \alpha_1\psi_1^*\psi_2 - \sigma_{11}|\psi_1|^2\psi_1 - \sigma_{12}|\psi_2|^2\psi_1 = \frac{c}{2n\omega}\Delta_\perp\psi_1, \quad (1)$$

$$i\frac{\partial\psi_2}{\partial z} - \alpha_2\psi_1^2 - \sigma_{21}|\psi_1|^2\psi_2 - \sigma_{22}|\psi_2|^2\psi_2 = \frac{c}{4n\omega}\Delta_\perp\psi_2. \quad (2)$$

Здесь $\tau = t - z/v_g$, t – время, v_g и n – линейные групповая скорость и показатель преломления соответственно, одинаковые для обеих частот,

$\beta = \partial v_g^{-1}/\partial\omega$ – параметр ДГС на основной частоте ω , c – скорость света в вакууме, $\alpha_{1,2} = 4\pi\omega\chi_{1,2}^{(2)}/cn$, $\chi_1^{(2)}$ и $\chi_2^{(2)}$ – нелинейные восприимчивости второго порядка на основной частоте и на частоте второй гармоники соответственно; параметры σ_{11} , σ_{12} , σ_{21} и σ_{22} , определяющие керровскую нелинейность, могут быть представлены через зависящие от частоты кубические восприимчивости $\chi^{(3)}$:

$$\sigma_{11} = 6\pi\omega\chi^{(3)}(\omega, -\omega, \omega)/cn,$$

$$\sigma_{12} = 12\pi\omega\chi^{(3)}(2\omega, -2\omega, \omega)/cn,$$

$$\sigma_{21} = 24\pi\omega\chi^{(3)}(\omega, -\omega, 2\omega)/cn,$$

$$\sigma_{22} = 12\pi\omega\chi^{(3)}(2\omega, -2\omega, \omega)/cn$$

[6], $\Delta_\perp$ – поперечный лапласиан.

Обычно в твердых диэлектриках керровская нелинейность имеет фокусирующий характер ($\chi^{(3)} > 0$), что как раз и представляет интерес для рассматриваемого нами случая. Поэтому везде ниже мы будем полагать, что все коэффициенты σ_{11} , σ_{12} , σ_{21} и σ_{22} положительны. Более того, в целях простоты будем пренебрегать дисперсией квадратичной и керровской нелинейных восприимчивостей. Тогда, как видно из вышеприведенных выражений, имеем соотношения: $\alpha_1 = \alpha_2 \equiv \alpha$, $\sigma_{21} = 2\sigma_{12} = 2\sigma_{22} = 4\sigma_{11} \equiv 4\sigma$.

3. Метод усредненного лагранжиана. Для получения приближенного аналитического решения системы (1), (2) в виде двухчастотной световой пули используем метод усредненного лагранжиана [25, 26].

При обозначенных условиях системе (1) соответствует плотность лагранжиана

$$L = L_1 + L_2 + L_{\text{int}}, \quad (3)$$

где

$$L_1 = \frac{i}{3}\left(\psi_1^*\frac{\partial\psi_1}{\partial z} - \psi_1\frac{\partial\psi_1^*}{\partial\tau}\right) - \frac{\beta}{2}\left|\frac{\partial\psi_1}{\partial\tau}\right|^2 - \frac{\sigma}{2}|\psi_1|^4 + \frac{c}{2n\omega}|\nabla_\perp\psi_1|^2, \quad (4)$$

$$L_2 = \frac{i}{4}\left(\psi_2^*\frac{\partial\psi_2}{\partial z} - \psi_2\frac{\partial\psi_2^*}{\partial z}\right) - \frac{\sigma}{2}|\psi_2|^4 + \frac{c}{8n\omega}|\nabla_\perp\psi_2|^2, \quad (5)$$

$$L_{\text{int}} = -\frac{\alpha}{2}(\psi_1^2\psi_2^* + \psi_1^{*2}\psi_2) - 2\sigma|\psi_1|^2|\psi_2|^2, \quad (6)$$

$\nabla_\perp$ – оператор поперечного градиента.

Отталкиваясь от результатов работы [24], запишем пробные решения в виде:

$$\psi_1 = F_1 e^{i\Phi} \text{sech}(Q\tau), \quad \psi_2 = F_2 e^{2i\Phi} \text{sech}^2(Q\tau), \quad (7)$$

где F_1 , F_2 , Q и Φ – подлежащие определению функции координат.

Подставляя (7) в (3)–(6), будем иметь для усредненного лагранжиана $\Lambda = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} L dt$:

$$\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_{\text{int}}, \quad (8)$$

где

$$\Lambda_1 = -\frac{F_1^2}{Q} \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{\beta}{6} F_1^2 Q - \frac{\sigma}{3} \frac{F_1^4}{Q} + \frac{c}{2n\omega} \frac{F_1^2}{Q} (\nabla_{\perp} \Phi)^2 + \frac{c}{2n\omega} \left(\frac{F_1'^2}{Q} - \frac{F_1 F_1'}{Q^2} + \frac{\pi^2 + 12}{36Q^3} \right) (\nabla_{\perp} Q)^2, \quad (9)$$

$$\Lambda_2 = -\frac{2F_2^2}{3Q} \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{8\sigma}{35} \frac{F_2^4}{Q} + \frac{c}{3n\omega} \frac{F_2^2}{Q} (\nabla_{\perp} \Phi)^2 + \frac{c}{12n\omega} \left(\frac{F_2'^2}{Q} - \frac{F_2 F_2'}{Q^2} + \frac{\pi^2}{15Q^3} \right) (\nabla_{\perp} Q)^2, \quad (10)$$

$$\Lambda_{\text{int}} = -\frac{2\alpha}{3} \frac{F_1^2 F_2}{Q} - \frac{16\sigma}{15} \frac{F_1^2 F_2^2}{Q}. \quad (11)$$

Здесь считается, что амплитуды F_1 и F_2 зависят от переменной Q , а штрих сверху обозначает производную по данной переменной.

Исследуем вначале режим одномерного распространения двухчастотного импульса вдоль оси z . Для этого положим в (9) и (10) $\nabla_{\perp} \Phi = \nabla_{\perp} Q = 0$. Тогда из условий $\partial(\partial\Lambda/\partial(\partial\Phi/\partial z))/\partial\Lambda/\partial F_1 = \partial\Lambda/\partial F_2 = \partial\Lambda/\partial Q = 0$ имеем систему уравнений:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -\frac{\beta}{6} Q^2 - \frac{2\alpha}{3} F_2 - \frac{2\sigma}{3} F_1^2 - \frac{16}{15} \sigma F_2^2, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -\frac{\alpha}{2} \frac{F_1^2}{F_2} - \frac{8\sigma}{5} F_1^2 - \frac{24}{35} \sigma F_2^2, \quad (13)$$

$$\left(F_1^2 + \frac{2}{3} F_2^2 \right) \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{\beta}{6} Q^2 F_1^2 - \frac{2\alpha}{3} F_1^2 F_2 - \frac{\sigma}{3} F_1^4 - \frac{8}{35} \sigma F_2^4 - \frac{16}{15} \sigma F_1^2 F_2^2. \quad (14)$$

Полагая вначале $\sigma = 0$, получим из этой системы $F_2 = -F_1 = -\beta Q^2/\alpha = \text{const}$, $\partial\Phi/\partial z = \beta Q^2/2$. Эти соотношения в точности совпадают с соответствующими выражениями, полученными в [24] прямым интегрированием системы (1), (2) при $\Delta_{\perp} \psi_1 = \Delta_{\perp} \psi_2 = \alpha_1 = \alpha_2 \equiv \alpha$, $\sigma_{21} = \sigma_{12} = \sigma_{22} = \sigma_{11} = 0$. Данное обстоятельство является хорошим аргументом в пользу используемого подхода.

Теперь примем во внимание, что зависимость поляризационного отклика среды от электрического

поля импульса имеет характер разложения по степеням данного поля. Учитывая это, при решении системы (12)–(14) будем оставлять только слагаемые, линейные по параметру σ . Тогда после простых, но громоздких выкладок будем иметь:

$$F_1 = \frac{\beta}{\alpha} Q^2 + \frac{1313}{210} \sigma \frac{\beta^2}{\alpha^3} Q^4, \quad (15)$$

$$F_2 = -\frac{\beta}{\alpha} Q^2 + \frac{41}{30} \sigma \frac{\beta^2}{\alpha^3} Q^4. \quad (16)$$

Возвращаясь к лагранжиану (8)–(11) и следуя подходу, использованному в работах [26–28], будем считать функциональные соотношения (15), (16) справедливыми и в неодномерном случае. Данное утверждение согласуется, в частности, с тем, что дифракция здесь учитывается в параксиальном приближении.

Подставляя (15) и (16) в (8)–(11) и удерживая только слагаемые, линейные по σ , придем к усредненному лагранжиану

$$\tilde{\Lambda} \equiv \frac{3\alpha^2}{5\beta^2} \Lambda = -\rho \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \frac{c}{2n\omega} \rho (\nabla_{\perp} \Phi)^2 + \frac{3\beta}{10} Q^5 + \frac{11243}{2100} \sigma \frac{\beta^2}{\alpha^2} Q^7 + \tilde{\Lambda}_D, \quad (17)$$

где

$$\rho = Q^3 + \frac{1997}{175} \frac{\sigma \beta}{\alpha^2} Q^5, \quad (18)$$

а часть лагранжиана $\tilde{\Lambda}_D$, учитывающая влияние дифракции, имеет вид:

$$\tilde{\Lambda}_D = \frac{c}{10n\omega} \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right) Q (\nabla_{\perp} Q)^2. \quad (19)$$

При получении (19) из (9), (10) в силу параксиального приближения учитывались только первые слагаемые в правых частях (15) и (16).

Обращая равенство (18) с учетом того, что второе слагаемое в правой части играет роль возмущения, получим:

$$Q = \rho^{1/3} - \frac{1997}{525} \frac{\sigma \beta}{\alpha^2} \rho. \quad (20)$$

Подставляя (20) в (17), (19) и вводя обозначение $\varphi = -c\Phi/n\omega$, при учете только линейных относительно σ слагаемых будем иметь лагранжиан

$$\tilde{\Lambda} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \rho \frac{(\nabla_{\perp} \varphi)^2}{2} + \frac{3c\beta}{10n\omega} \rho^{5/3} - \frac{739}{2100} \frac{c}{n\omega} \frac{\sigma \beta^2}{\alpha^2} \rho^{7/3} + \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right) \left(\frac{c}{n\omega} \right)^2 \frac{(\nabla_{\perp} \rho)^2}{90\rho}. \quad (21)$$

Соответствующие уравнения Эйлера–Лагранжа относительно переменных ρ и φ имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} + \nabla_{\perp}(\rho \nabla_{\perp} \varphi) = 0, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \frac{(\nabla_{\perp} \varphi)^2}{2} + \frac{c}{2n\omega} \beta \rho^{2/3} - \frac{739}{900} \frac{c}{n\omega} \frac{\sigma \beta^2}{\alpha^2} \rho^{4/3} = \\ = \frac{2}{45} \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right) \left(\frac{c}{n\omega} \right)^2 \frac{\Delta_{\perp} \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}. \end{aligned} \quad (23)$$

Система (22), (23) формально схожа с уравнениями двумерного течения некой квантовой бозе-жидкости [29] со сложным внутренним взаимодействием между частицами. Внутреннее давление p в этой жидкости состоит из двух аддитивных частей p_1 и p_2 , зависящих от плотности ρ . При этом $p_1 \sim \rho^{5/3}$, $p_2 \sim \rho^{7/3}$ (см. соответственно третье и четвертое слагаемые в левой части (23)). Роль времени здесь играет координата z .

Отмеченная аналогия станет более явной, если заметить, что система (22), (23) эквивалентна уравнению:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{g}{2} \Delta_{\perp} G - \\ - \frac{c}{2n\omega \alpha^2} \left(\alpha^2 \beta |G|^{4/3} - \frac{739}{450} \sigma \beta^2 |G|^{8/3} \right) G, \end{aligned} \quad (24)$$

где G – комплексная функция координат, определяемая преобразованием Маделунга:

$$G = \sqrt{\rho} e^{-ig\varphi}, \quad (25)$$

$$g = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{1}{5} \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right)} \frac{c}{n\omega} \approx 0.90 \frac{c}{n\omega}.$$

Можно также провести аналогию с непрерывным световым пучком, распространяющимся в среде, обладающей сложной нелинейностью. При этом первое слагаемое в скобках (24) соответствует исходной квадратичной нелинейности, а второе – керровской.

4. Двухчастотные световые пули. Уравнение непрерывности (22) обладает автомодельным “аксиально-симметричным” локализованным решением [30]:

$$\rho = \rho_0 \frac{R_0^2}{R^2} \exp \left(-\frac{3r^2}{4R^2} \right), \quad \varphi = f(z) + \frac{r^2}{2R} \frac{dR}{dz}, \quad (26)$$

где ρ_0 – постоянная величина, связанная с пиковым значением интенсивности основной компоненты импульса (см. ниже), r – расстояние от оси симметрии двухчастотного светового импульса до его произвольного периферийного участка, $R = R(z)$ – характерный поперечный размер сгустка световой энергии, R_0 – равновесное значение параметра R , $f(z)$ – подлежащая определению функция.

Правой частью уравнения (23) учитывается влияние дифракции на распространение оптического импульса. Пренебрежение данной правой частью равносильно приближению геометрической оптики.

Подставим теперь (26) в (23). При этом в левой части используем приосевое приближение [30, 31], положив $\exp(-3r^2/4R^2) \approx 1 - 3r^2/4R^2$. После приравнивания в левой и правой частях множителей при r^0 и r^2 придем к уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dz} = -\frac{c}{2n\omega} \beta \rho_0^{2/3} \frac{R_0^{4/3}}{R^{4/3}} + \frac{739}{900} \frac{c}{n\omega} \frac{\sigma \beta^2}{\alpha^2} \rho_0^{4/3} \frac{R_0^{8/3}}{R^{8/3}} - \\ - \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right) \left(\frac{c}{n\omega} \right)^2 \frac{1}{15R^2}, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dz^2} = -\frac{\partial U}{\partial R} = \frac{c}{2n\omega} \beta \rho_0^{2/3} \frac{R_0^{4/3}}{R^{7/3}} - \\ - \frac{739}{450} \frac{c}{n\omega} \frac{\sigma \beta^2}{\alpha^2} \rho_0^{4/3} \frac{R_0^{8/3}}{R^{11/3}} + \left(\frac{7\pi^2}{60} + 8 \right) \left(\frac{c}{n\omega} \right)^2 \frac{1}{20R^3}. \end{aligned} \quad (28)$$

Уравнение (28) представляет собой уравнение движения ньютоновской частицы единичной массы во внешнем поле с “потенциальной энергией” $U(R)$, где R и z формально играют роли координаты частицы и времени соответственно.

Последнее слагаемое в правой части (28) соответствует эффектам дифракции. В свою очередь, первое и второе слагаемые в правой части описывают влияние квадратичной и керровской нелинейностей соответственно.

Очевидно, условия формирования устойчивой световой пули имеют вид:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial R} \right)_{R=R_0} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R^2} \right)_{R=R_0} > 0, \quad (29)$$

что соответствует наличию локального минимума в зависимости $U(R)$ при равновесном значении радиуса пули.

Простой анализ показывает, что условиям (29) при учете (28) можно удовлетворить только, если $\beta < 0$. Таким образом, ДГС должна быть аномальной. Тогда при фокусирующей керровской нелинейности ($\sigma > 0$) из (28) и (29) приходим к неравенствам:

$$\tau_0 > \tau_c = 1.81 \frac{\sqrt{\sigma |\beta|}}{|\alpha|}, \quad R_0 > R_c = \frac{1.23}{|\alpha|} \sqrt{\frac{c}{n\omega}} \sigma, \quad (30)$$

$$\psi_{1m} < \psi_c = 0.30 \frac{|\alpha|}{\sigma}, \quad (31)$$

где $\tau_0 = 1/Q_0 \approx 1/\rho_0^{1/3}$ – длительность световой пули в центре ее поперечного сечения, $\psi_{1m} \approx |\beta/\alpha| Q_0^2 \approx |\beta/\alpha| \rho_0^{2/3}$ – пиковое значение амплитуды световой пули (см. (7) и (20)).

Ввиду особой важности условий (30) и (31) перепишем их, используя параметры, непосредственно измеряемые в условиях эксперимента:

$$\tau_0 > \tau_c = 0.06 \frac{c}{\chi^{(2)}} \sqrt{\frac{|\beta| n n_2}{\omega}}, \quad (32)$$

$$R_0 > R_c = 0.04 \frac{c}{\omega \chi^{(2)}} \sqrt{c n_2},$$

$$I_m < I_c = 91.7 \frac{\chi^{(2)2}}{c n n_2^2}. \quad (33)$$

Здесь $I_m = c \psi_{1m}^2 / 2\pi n$ – пиковое значение интенсивности световой пули на основной частоте, определяемое в рассматриваемом случае выражением:

$$I_m = \frac{c^3 \beta^2 n}{64\pi^3 \chi^{(2)2} \omega^2 \tau_0^4}, \quad (34)$$

n_2 – нелинейный показатель преломления на частоте ω , определяющий аддитивную, пропорциональную интенсивности, добавку к линейному показателю преломления; при этом $\sigma = \omega n_2 / 2\pi n$ [6].

Оставляя в правых частях (15), (16), (18) и (20) только первые слагаемые, а также используя (7) и (26), для интенсивностей компонент равновесной ($R = R_0$) световой пули будем иметь:

$$\begin{aligned} I_1 &= I_m e^{-r^2/R_0^2} \operatorname{sech}^2 \left(e^{-r^2/4R_0^2} \frac{\tau}{\tau_0} \right), \\ I_2 &= I_m e^{-r^2/R_0^2} \operatorname{sech}^4 \left(e^{-r^2/4R_0^2} \frac{\tau}{\tau_0} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

В этом же приближении из (28) и первого условия (29) найдем связь между апертурой R_0 и временной длительностью τ_0 световой пули:

$$R_0 = 0.96 \sqrt{\frac{c}{n\omega|\beta|}} \tau_0. \quad (36)$$

Из (35) видно, что временная длительность τ_p световой пули минимальна в центре ее поперечного сечения ($\tau_p = \tau_0$) и возрастает на периферийных участках по закону $\tau_p = \tau_0 e^{r^2/4R_0^2}$.

Роль керровской нелинейности здесь сводится к ограничениям (32) и (33). Видно, что в отсутствие керровской нелинейности ($n_2 = 0$) условия (32) и (33) выполняются автоматически.

Малые отклонения апертуры пули от значения R_0 при выполнении условий (32) и (33) приведут к тому, что распространение двухчастотной световой пули будет сопровождаться осцилляциями длительности, апертуры и интенсивностей ее компонент около

равновесных значений [19]. Соответствующая аналитическая процедура связана с линеаризацией уравнения (28) в окрестности и выходит за рамки настоящей работы.

Приведем некоторые численные оценки. Взяв для кристалла типа KDP в ближнем инфракрасном диапазоне $\omega \sim 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\chi_1^{(2)} \sim \chi_2^{(2)} \sim 10^{-9} \text{ СГСЭ}$, $n_2 \sim 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$, $|\beta| \sim 10^{-28} \text{ см}^2/\text{с}$ [32], из (32) и (33) найдем $\tau_c \sim 10^{-15} \text{ с}$, $R_c \sim 10^{-4} \text{ см}$, $I_c \sim 10^{12} \text{ Вт/см}^2$. Для нелинейной добавки к линейному показателю преломления имеем $n_2 I_c \sim 10^{-4}$.

Отмеченные числовые параметры соответствуют интенсивным фемтосекундным импульсам, содержащим порядка одного периода оптических колебаний. Здесь проходит грань между применимостью и неприменимостью приближения ММА. В работах [3, 4, 33, 34] показано, что данное приближение хорошо себя проявляет даже в случаях, когда оптический импульс содержит всего порядка 3–5 колебаний.

Приведенная выше оценка показывает, что величина минимальной апертуры порядка длины волны оптического импульса, что в данном пределе ставит под вопрос возможность применимости параксиального приближения.

Заметим, что верхнее ограничение на интенсивность импульса из-за керровской нелинейности для формирования световой пули в режиме генерации второй гармоники было отмечено в работах [35, 36] в результате численных экспериментов. Простые оценки показывают, что верхняя граница интенсивности, найденная в [35, 36] для конкретных параметров среды, по порядку величины совпадает с соответствующей величиной I_c , определенной здесь по формуле (33). Отметим также, что в работе [22] констатируется верхний предел не на интенсивность, а на энергию импульса.

Обобщая сказанное выше, можно утверждать, что керровская нелинейность способна оказывать существенное влияние на саму возможность формирования двухчастотных световых пучков в режиме генерации второй гармоники при интенсивностях импульсов $I \sim 10^{11} - 10^{12} \text{ Вт/см}^2$, длительность и апертура которых составляют порядка 10 фс и 10 мкм соответственно.

Для оценки дистанции, на которой способна сформироваться рассмотренная выше двухчастотная световая пуля, примем к сведению, что в этих условиях дисперсионная, дифракционная и нелинейная длины являются величинами одного порядка [19]. Каждая из них может выступать в роли данной дистанции. Взяв $\tau_0 \sim 10 \text{ фс}$, будем иметь $R_0 \sim 10 \text{ мкм}$. Тогда для дифракционной длины l_D

имеем оценку $l_D \square \omega R_0^2/c \sim 0.1\text{--}1$ см. На дистанциях такого порядка может сформироваться световая пуля.

5. Заключительные замечания. Предложенная в настоящей работе версия усредненного лагранжиана позволила провести аналитическое исследование возможности формирования двухчастотных световых пуль в режиме генерации второй гармоники. Аналогичные версии, предложенные ранее в работах [26, 28], отталкивались от точных одномерных решений нелинейных волновых уравнений. Далее предполагалось, что в неодномерном случае функциональные зависимости между длительностью импульса и его амплитудой остаются такими же, как в точном одномерном решении, с тем отличием, что теперь оба параметра зависят от координат. В нашем случае точное одномерное решение системы (1), (2) неизвестно. Поэтому одномерный случай был рассмотрен на первой приближенной стадии метода усредненного лагранжиана подобно тому, как это было сделано в [25]. Сохранение отмеченных выше функциональных зависимостей на неодномерной стадии соответствует квазиодномерному приближению [26, 28]. Данное обстоятельство, по крайней мере, качественно согласуется с принятым здесь параксиальным приближением для учета дифракции.

Отмеченный выше подход позволил прийти к ограничениям (32), (33) для апертуры, длительности и интенсивности импульса, при выполнении которых способна формироваться двухчастотная световая пуля. При нарушении данных ограничений фокусирующая керровская нелинейность приводит к необратимому коллапсу светового импульса. Что касается условия на интенсивность, то оно качественно согласуется с аналогичным условием, отмеченным в работах [35, 36], где использовались численные методы.

Здесь в целях простоты мы пренебрегали зависимостью нелинейных восприимчивостей от частоты. Это позволило записать ограничения (32) и (33), а также другие формулы в компактном виде. Принципиальных проблем для учета частотной дисперсии нелинейных восприимчивостей в рамках использованного подхода не существует. Только выкладки и формулы в этом случае окажутся более громоздкими.

В настоящей работе считаются одновременно выполненными условия фазового и группового синхронизмов, что вряд ли реализуемо в условиях реального эксперимента. Поэтому следующим шагом в обозначенном здесь направлении исследований может стать аналитическое рассмотрение формирования двухчастотной световой пули в услови-

ях, когда нарушено хотя бы одно из условий синхронизма.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств государственного задания Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. Ю. Н. Карамзин, А. П. Сухоруков, Письма в ЖЭТФ **20**, 734 (1974) [Yu. N. Karamzin and A. P. Sukhorukov, JETP Lett. **20**, 339 (1974)].
2. Ю. Н. Карамзин, А. П. Сухоруков, ЖЭТФ **68**, 834 (1975) [Yu. N. Karamzin and A. P. Sukhorukov, Sov. Phys. – JETP **41**, 414 (1976)].
3. T. Brabek and F. Krausz, Rev. Mod. Phys. **72**, 545 (2000).
4. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
5. Y. Silberberg, Opt. Lett. **15**, 1282 (1990).
6. Ю. С. Кившарь, Г. П. Агравал, *Оптические солитоны: от волоконных световодов к фотонным кристаллам*, Физматлит, М. (2005) [Yu. S. Kivshar and G. P. Agrawal, *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals*, Academic Press, N.Y. (2003)].
7. S. V. Sazonov, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 124404 (2016).
8. S.-S. Yu, C.-H. Chien, Y. Lai, and J. Wang, Opt. Commun. **119**, 167 (1995).
9. S. Raghavan and G. P. Agrawal, Opt. Commun. **180**, 377 (2000).
10. W. H. Renninger and F. W. Wise, Nat. Commun. **4**, 1719 (2013).
11. O. V. Shtyrina, M. P. Fedoruk, Yu. S. Kivshar, and S. K. Turitsyn, Phys. Rev. A **97**, 013841 (2018).
12. S. V. Sazonov, Phys. Rev. A **100**, 043828 (2019).
13. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **117**, 292 (2023).
14. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **119**, 579 (2024).
15. X. Liu, L. J. Qian, and F. W. Wise, Phys. Rev. Lett. **82**, 4631 (1999).
16. А. П. Сухоруков, *Нелинейные волновые взаимодействия в оптике и радиофизике*, Наука, М. (1988).
17. H. Sakaguchi and B. A. Malomed, Opt. Soc. Am. B **29**, 2741 (2012).
18. I. N. Towers, B. A. Malomed, and F. W. Wise, Phys. Rev. Lett. **90**, 1239021 (2003).
19. S. V. Sazonov, M. S. Mamaikin, M. V. Komissarova, and I. G. Zakharova, Phys. Rev. E **96**, 022208 (2017).
20. A. A. Kanashov and A. M. Rubenchik, Physica D **4**, 122 (1981).
21. D. Mihalache, D. Mazilu, L.-C. Crasovan, I. Towers, B. A. Malomed, A. V. Buryak, L. Torner, and F. Lederer, Phys. Rev. E **66**, 016613 (2002).

22. D. Mihalache, D. Mazilu, B. A. Malomed, F. Lederer, L.-C. Crasovan, Y. V. Kartashov, and L. Torner, *Phys. Rev. E* **74**, 047601 (2006).
23. N.-C. Panoiu and R. M. Osgood, Jr., B. A. Malomed, F. Lederer, D. Mazilu, and D. Mihalache, *Phys. Rev. E* **71**, 036615 (2005).
24. С. В. Сазонов, М. В. Комиссарова, Письма в ЖЭТФ **111**, 355 (2020) [S. V. Sazonov and M. V. Komissarova, *JETP Lett.* **111**, 320 (2020)].
25. D. Anderson, *Phys. Rev. A* **27**, 3135 (1983).
26. С. К. Жданов, Б. А. Трубников, ЖЭТФ **92**, 1612 (1987) [S. K. Zhdanov and B. A. Trubnikov, *Sov. Phys. JETP* **65**, 904 (1987)].
27. D. Anderson, M. Desaix, M. Lisak, and M. L. Quoridia-Teixeiro, *J. Opt. Soc. Am. B* **9** 1358 (1992).
28. С. В. Сазонов, ЖЭТФ **130**, 145 (2006) [S. V. Sazonov, *JETP* **103**, 126 (2006)].
29. Д. Р. Тилли, Дж. Тилли, *Сверхтекучесть и сверхпроводимость*, Мир, М. (1977) [D. R. Tilley and J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity*, Van Nostrand Reinhold, N.Y. (1974)].
30. Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко, *Колебания, волны, структуры*, Физматлит, М. (2001), 496 с.
31. С. А. Ахманов, А. П. Сухоруков, Р. В. Хохлов, Успехи физических наук **93**, 19 (1967) [S. A. Akhmanov, A. P. Sukhorukov, and R. V. Khokhlov, *Sov. Phys.-Uspekhi* **10**, 609 (1968)].
32. А. Ярив, *Квантовая электроника*, Сов. Радио, М. (1980) [A. Yariv, *Quantum Electronics*, John Wiley & Sons, N.Y. (1989)].
33. A. A. Drozdov, S. A. Kozlov, A. A. Sukhorukov, and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rev. A* **86**, 053822 (2012).
34. S. V. Sazonov, *Journal of Russian Laser Research* **39**, 252 (2018).
35. A. A. Kalinovich, M. V. Komissarova, S. V. Sazonov, and I. G. Zakharova, *Proc. SPIE* **11770**, 117700D (2021).
36. А. А. Калинович, И. Г. Захарова, М. В. Комиссарова, С. В. Сазонов, Известия РАН. Сер. Физическая **86**, 25 (2022) [A. A. Kalinovich, I. G. Zakharova, M. V. Komissarova, and S. V. Sazonov, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **86**, 9 (2022)].

Спектры пропускания инфракрасного излучения в TiS_3 : край фундаментального поглощения, фононы и экситоны¹⁾

К. Н. Болдырев⁺, Е. В. Мостовщикова*, А. Н. Титов*, В. Я. Покровский^{× 2)}, И. Г. Горлова[×]

⁺Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

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

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

Поступила в редакцию 2 июня 2024 г.

После переработки 9 сентября 2024 г.

Принята к публикации 9 сентября 2024 г.

Исследованы спектры пропускания инфракрасного и видимого излучения монокристаллическими вискерами TiS_3 при разных поляризациях света в диапазоне температур от комнатной до гелиевой. Определены абсолютные значения коэффициента поглощения. В области дальнего инфракрасного излучения наблюдались неизвестные ранее фононные моды. Изучена зависимость ширины запрещенной зоны $\mathcal{E}_g$ от температуры и показано, что $\mathcal{E}_g$ увеличивается на 50 мэВ при охлаждении от 300 до 5 К. Сравнение спектров, снятых при разных направлениях поляризации, указывает на анизотропию оптической щели. Ниже ~ 150 К обнаружен пик поглощения с энергией 1.28 эВ, который объясняется возбуждением экситонов.

DOI: 10.31857/S0370274X24100164, EDN: NQACFO

Трихалькогениды с общей формулой MX_3 , где М – переходные металлы IV группы – Ti, Zr, Hf, а X = S, Se, Te, исследуются с 1960 гг. [1–4]. Эти соединения интересны своей анизотропной структурой, которую можно назвать и слоистой, и квазидомерной. Атомные слои, параллельные плоскости ab в этих материалах, соединяются друг с другом за счет сил ван дер Вальса. Внутри слоев цепочки атомов металла параллельные оси $\mathbf{b}$, изолированные друг от друга атомами халькогена, определяют направление наибольшей проводимости. Особенности структуры проявляются в анизотропии физических свойств. В частности, наблюдается анизотропия зонной структуры и характеристик носителей заряда. Соответственно, электрические, оптические, тепловые и фононные свойства этих материалов различны в разных направлениях кристалла, в том числе, в плоскости слоев.

Трисульфид титана (TiS_3) имеет оптическую ширину запрещенной зоны $\mathcal{E}_g$ около 1 эВ [1, 5, 6], приблизительно как в кремнии. При этом температурные зависимости сопротивления и холловской концентрации носителей [7, 8] характеризуются энергией активации 35–40 мэВ, соответствующей энергии

донорного уровня [1, 5, 9, 10]. Таким образом, TiS_3 представляет собой полупроводниковый материал n -типа.

Сильно анизотропные электронные [11–13] и оптические [14–17] свойства, нелинейная проводимость [11, 18], возможность перестройки электронного спектра за счет эффекта поля [19–21], делают TiS_3 перспективным материалом для электронных и оптоэлектронных устройств [22]. TiS_3 способен поглощать свет в диапазоне от видимого до ближнего инфракрасного (ИК). Согласно расчетам [23] ширина запрещенной зоны TiS_3 практически не зависит от толщины, т.е. от количества слоев в исследуемом образце. На зонную структуру TiS_3 могут влиять деформация, особенно в направлениях в плоскости ab [23–25], и морфология кристалла: свойства нитевидных и плоских монокристаллов могут существенно отличаться [22]. Вместе с тем, на сегодняшний день энергетическая структура TiS_3 изучена недостаточно. Так, не исследованы состояния в области края зоны проводимости, в том числе – донорный уровень, не установлено, является ли TiS_3 прямозонным полупроводником.

В работе [14] исследована анизотропия в плоскости ab электрических и оптических свойств плоских монокристаллов TiS_3 толщиной в несколько атомных слоев. Показано, что спектры комбинационного рассеяния зависят от направления поляризации

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

²⁾e-mail: vadim.pokrovskiy@mail.ru

излучения, как падающего, так и детектируемого. Наблюдается также сильный линейный дихроизм [14, 16, 26, 27] – зависимость оптического поглощения от кристаллографической ориентации материала по отношению к направлению поляризации падающего света. Величина дихроизма намного превышает значения, наблюдаемые в черном фосфоре – материале, перспективном для электроники и оптоэлектроники [28, 29]. В рассчитанных теоретически и полученных экспериментально спектрах [14, 26, 27] рост поглощения при направлении электрического поля $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ начинается при меньших энергиях фотона и происходит резче, чем при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$. Эти результаты указывают на анизотропию щели в TiS_3 , хотя авторы [14, 26, 27] анизотропию щели в явном виде не отмечают.

Исследования спектров отражения и поглощения трисульфида титана достаточно обширны (к предыдущим ссылкам добавим [30, 31]), однако все исследования проводились только вблизи комнатной температуры. Кроме того, за исключением недавней работы [26], исследований в поляризованном излучении не проводилось.

Для анализа фононной системы в основном рассматривались спектры комбинационного рассеяния и отражения [3, 4]. В настоящей работе исследуются спектры пропускания в дальней ИК области, дающие информацию об оптических фононах, их анизотропии и температурной эволюции. Также исследованы спектры пропускания в ближней ИК и видимой области, позволяющие определить форму края фундаментального поглощения и изучить другие состояния в этой области энергий.

Особый интерес к исследованию энергетической структуры TiS_3 связан с многочисленными указаниями на фазовый переход в коллективное состояние в этом квазиодномерном полупроводнике [18, 32]. Ряд особенностей проводимости [11], магнитотранспорта [8, 13] и эффекта поля [20] при $T \sim 50$ K указывает на возникновение коллективного состояния типа волны зарядовой плотности (ВЗП) [33]. Нелинейная проводимость, которая наблюдается ниже 50 K и резко возрастает при $T \leq 15$ K, может быть связана со скольжением ВЗП. Другим объяснением аномалий может быть формирование экситонного изолятора (переход Келдыша–Копаева) [34, 35], возможность которого в TiS_3 обсуждалась в [11, 36–38]. Хотя величина щели в TiS_3 , 1 эВ, явно велика по сравнению с энергией экситона, в [38] высказано предположение, что энергию экситона правильно сравнивать с энергией ионизации донорного уровня, 35–40 мэВ (возможно, минизоны [10]). Поэтому актуальность настоящей работы связана так-

же с исследованием спектров пропускания в области края фундаментального поглощения в температурном интервале, включающем область предполагаемого перехода.

Монокристаллические образцы TiS_3 были выращены методом газотранспортных реакций с использованием в качестве исходной шихты TiS_2 и избытка серы [39]. Кристаллы имеют вид ограниченных лент длиной несколько миллиметров, шириной до 500 мкм. Элементный состав с использованием просвечивающего электронного микроскопа Tescan G² 30 Twin был определен как $\text{TiS}_{3.0 \pm 0.2}$, т.е. в пределах погрешности соответствует стехиометрии.

Рентгенограмму порошка, полученного измельчением кристаллов, удалось индиферировать в пространственной группе P21/m (моноклинная сингония) с постоянными решетками $a = 4.966$; $b = 3.405$; $c = 8.801$; $\beta = 97.38$. Эти данные хорошо согласуются с данными, имеющимися в литературе [JCPDS-ICDD15-0783] и [2, 19, 40]. Структурные исследования наших монокристаллов свидетельствуют о возможном присутствии в них двойников, однако двойникование в TiS_3 не влияет на ориентацию осей a и b [41, 42], вдоль которых был направлен вектор $\mathbf{E}$ при исследованиях в поляризованном излучении.

Были исследованы спектры пропускания в дальней и средней ИК области в диапазоне 40–700 см^{-1} (энергия фотона $\mathcal{E} = 5\text{--}90$ мэВ, длина волны 250–14 мкм) при температурах 10 и 300 K, а также в ближней ИК и видимой области 3300–16000 см^{-1} (420–1900 мэВ, 3–0.65 мкм), в области края фундаментального поглощения. Измерения были проведены как в неполяризованном, так и в линейно-поляризованном свете. Использовался всеволновой вакуумный фурье-спектрометр высокого разрешения Bruker IFS 125 HR. Для дальней ИК области в качестве детектора излучения использовался пироприемник DTGS, а в качестве источника излучения – глобар. Для ближней ИК и видимой области в качестве приемника использовались соответственно высокочувствительный InGaAs и охлаждаемый жидким азотом InSb, а в качестве источника – галогенная лампа. Для поляризации излучения в дальней ИК области спектра применялся проволочный поляризатор, а в ближнем ИК и видимом диапазонах – призма Глана–Тейлора с автоматизированной сменой угла.

Для охлаждения образца вплоть до $T = 4$ K применялся криостат замкнутого гелиевого цикла CryoMech PT403 с термоконтроллером LakeShore 335 и диодным датчиком температуры. Точность установки и регистрации температуры составляла ± 0.5 K во всем температурном диапазоне.

Были исследованы 3 образца шириной примерно 300 мкм, толщиной $d = 7 \pm 1$ мкм (образец #1), $d = 6 \pm 1$ мкм (образец #2), $d = 9 \pm 0.5$ мкм (образец #3).

Получены спектры пропускания TiS_3 в дальней ИК области. Детали измерений приведены в качестве дополнительных материалов (см. рис. S1 и табл. S1). Спектры пропускания приведены на рис. S1. Наблюдался ряд полос поглощения на оптически активных фоновых. Они перечислены в табл. S1. В спектрах пропускания кроме минимумов, связанных с фоновыми полосами, о которых ранее сообщалось в литературе, обнаружены дополнительные неглубокие минимумы при частотах $\sim 250 \text{ см}^{-1}$ и $\sim 375 \text{ см}^{-1}$. По-видимому, это неизвестные ранее фоновые моды. При понижении температуры от комнатной до 10 K (рис. S1b) заметно сужение фоновых полос и дополнительных минимумов. Значительных изменений в спектре, которые могли бы указывать на структурный фазовый переход, не обнаружено.

Особо отметим глубокий минимум пропускания при 326 см^{-1} . В области этого минимума пропускание падает почти на порядок сильнее, чем в области других минимумов (рис. 1). Как видно из табл. S1, этот минимум вызван мощными фононами ТО с частотой 320 см^{-1} и LO с частотой 340 см^{-1} . Поскольку положение минимума соответствует энергии 40 мэВ, что близко к энергии активации концентрации электронов, $n(T)$ в TiS_3 [7, 8], в этой области энергий можно ожидать поглощение на электронах при возбуждении их в зону проводимости с примесного уровня: согласно [1, 9], этот уровень находится на $\sim 40 \text{ мэВ}$ ниже ее дна. Однако на фоне столь сильного фонованого поглощения электронный вклад выделить трудно.

На рисунке 1 также четко виден минимум пропускания на частоте 221 см^{-1} . В дополнительных материалах показано, что поглощение в этой области можно объяснить фононами (ТО-колебание с частотой около $215\text{--}220 \text{ см}^{-1}$, LO – около 225 см^{-1}), однако однозначного вывода о природе этого провала мы пока сделать не можем.

Перейдем к спектрам пропускания в ближней ИК области. На рисунке 2а показаны спектры пропускания t монокристалла TiS_3 в зависимости от энергии кванта, $t(\mathcal{E})$, измеренные в неполяризованном свете в области края фундаментального поглощения TiS_3 при различных температурах. Уменьшение пропускания с ростом энергии в области 1.1–1.2 эВ связано с приближением к краю фундаментального поглощения. Видно, что понижение температуры приводит к сдвигу края поглощения в сторону больших энергий.

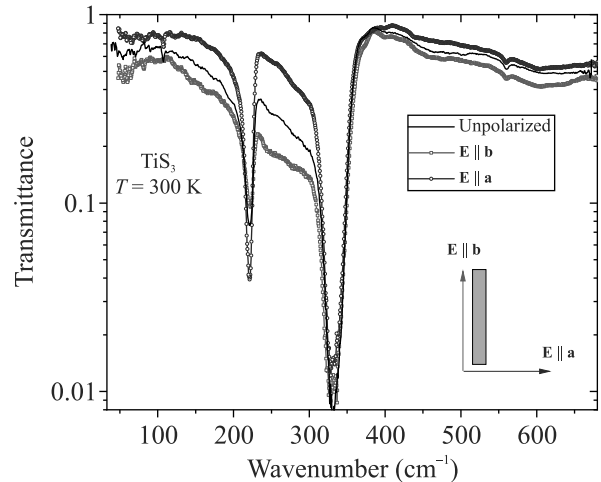


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры пропускания монокристалла TiS_3 #1 при $T = 300 \text{ K}$ в неполяризованном и в линейно-поляризованном свете (см. рис. S1a), представленные в полулогарифмическом масштабе

Для более точного определения ширины запрещенной зоны из данных оптического пропускания была рассчитана оптическая плотность $D \equiv \ln(1/t)$. Поскольку $t \approx (1 - R)e^{-\alpha d}$, а коэффициент отражения R близок к 0.1 и слабо меняется в интервале 500–1000 нм [30], пренебрегаем им по сравнению с единицей и получаем обычное в таком приближении выражение $D \approx \alpha d$.

На рисунке 2b показаны рассчитанные из спектров $t(\mathcal{E})$ зависимости $D(\mathcal{E})$. На правой оси показаны соответствующие значения α . Из рисунка 2b также виден сдвиг кривых в сторону высоких энергий с понижением температуры, отражающий рост запрещенной зоны. Вблизи края поглощения при температурах 200 и 300 K заметно небольшое “плечо” при 1.23 и 1.25 эВ соответственно. Ниже 200 K в этой области появляется узкий интенсивный пик с максимумом при 1.28 эВ, который может быть связан с экситонами [17, 43]. В целом, с понижением температуры щель становится “жестче”, т.е. край поглощения становится резче.

Для более детального изучения анизотропных оптических свойств и зонной структуры спектры пропускания были измерены в линейно поляризованном свете как при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$, так и при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$. На рисунке 3 показаны спектры оптической плотности при $T = 5 \text{ K}$ (a) и $T = 300 \text{ K}$ (b) в линейно поляризованном свете. Видно, что положение края поглощения, а также вид спектров оптической плотности $D(\mathcal{E})$, зависят от направления поляризации света и при комнатной температуре, и при $T = 5 \text{ K}$. Для поляризации, параллельной металлическим цепочкам ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$), край

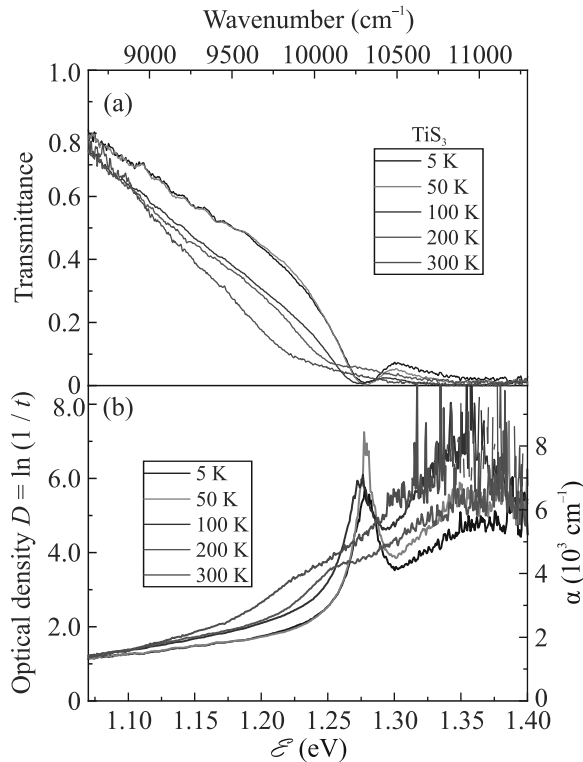


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры пропускания (а) и оптической плотности (б) в неполяризованном свете монокристалла TiS_3 #1 при температурах от 300 до 5 К. На правой оси приведены соответствующие значения коэффициента поглощения

гораздо резче, а рост $D(\mathcal{E})$ для энергий выше края фундаментального поглощения происходит гораздо быстрее. Аналогичные изменения в спектре поглощения при смене направления поляризации недавно наблюдались авторами [26] при комнатной температуре. Отметим также качественное сходство наблюдаемых нами спектров и их зависимости от направления $\mathbf{E}$ с расчетными [14, 15, 26, 27], хотя в работах [14, 27] край поглощения находится заметно выше по энергии.

Для определения типа межзонных переходов спектры (рис. 2b, 3) были перестроены в виде графиков Тауца [44] (см. дополнительные материалы, рис. S2). Анализ спектров, полученных в естественном излучении, указывает на то, что непрямой характер переходов более вероятен. В то же время анализ спектров в поляризованном излучении приводит к неоднозначным результатам. Добавим, что авторам предыдущих работ, в которых рассматривался характер межзонных переходов в TiS_3 [5, 6, 12, 16, 19, 23, 27, 30, 31, 45–51], также не удалось определить, является ли TiS_3 прямозонным полупроводником.

Хотя метод графика Тауца не позволил установить характер межзонных переходов, мы попытались с его помощью определить значения $\mathcal{E}_g$. Если переходы прямые, для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ оценки дают $\mathcal{E}_g \sim 1.1$ эВ при комнатной температуре и 1.18 эВ при 5 К. Для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ получено $\mathcal{E}_g \sim 0.98$ эВ при 300 К и 1.02 эВ при 5 К. Если переходы непрямые, соответствующие значения – 0.91 и 0.96 эВ.

По-видимому, недостаточная точность метода Тауца в нашем случае связана с размытием края щели, а также с близостью к нему донорного уровня (минизоны) и экситонной линии. Благодаря этим факторам оценки $\mathcal{E}_g$, приведенные выше, могут оказаться заниженными. Наиболее существенная ошибка в величине $\mathcal{E}_g$ может возникнуть при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$, если поглощение вблизи $\mathcal{E} = 1.28$ эВ связано с возбуждением экситонов. Если же край поглощения определять по началу резкого роста D , величину щели при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ можно оценить как 1.4–1.5 эВ (рис. 3а), т.е. существенно выше, чем при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$. Таким образом, наши экспериментальные данные указывают на различие значений $\mathcal{E}_g$ для направлений поляризации вдоль осей $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, так же как и результаты работ [14–16, 26, 27]. Аналогичным образом различаются и спектры фотопроводимости (при 77 К) [47].

Вне зависимости от интерпретации спектров поглощения наблюдается рост $\mathcal{E}_g$ примерно на 50 мэВ при понижении температуры от 300 К до 5 К.

Отдельно обсудим результаты исследования пропускания, указывающие на возникновение экситонных состояний. Как видно из рис. 2 и 3, изменение спектров пропускания и оптической плотности с понижением температуры не сводится просто к уменьшению размытия края поглощения и сдвигу его вверх по энергии. Ниже 200 К появляется пик поглощения с энергией 1.28 эВ. Логично связать этот пик с возбуждением экситонов [6, 43, 47]. Из спектров $D(\mathcal{E})$ видно, что амплитуда пика существенно зависит от направления поляризации (рис. 3). Наибольшей амплитуды пик достигает при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$. На рисунке 4 показана поляризационная зависимость оптической плотности при $T = 5$ К, измеренная на образце #2. В ходе измерений длина волны фиксировалась, и вектор поляризации проходил значения от 0 до 180°. В таком представлении предполагаемый экситонный пик выглядит как узкая красная полоса в районе 10275 cm^{-1} (1.28 эВ). Вертикальность полосы означает отсутствие сдвига пика при вращении вектора поляризации. При $T = 5$ К полоса наиболее четко видна при направлении $\mathbf{E}$ вдоль оси $\mathbf{a}$. При поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ пик на этом образце полностью исчезает. Таким образом, высота пика опре-

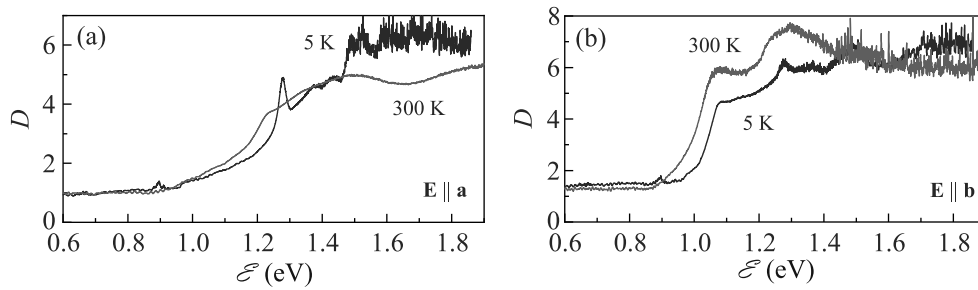


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры оптической плотности монокристалла TiS_3 # 1, измеренные при $T = 300$ K (красные кривые) и 5 K (синие кривые) в линейно поляризованном свете: $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ (a) и $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ (b)

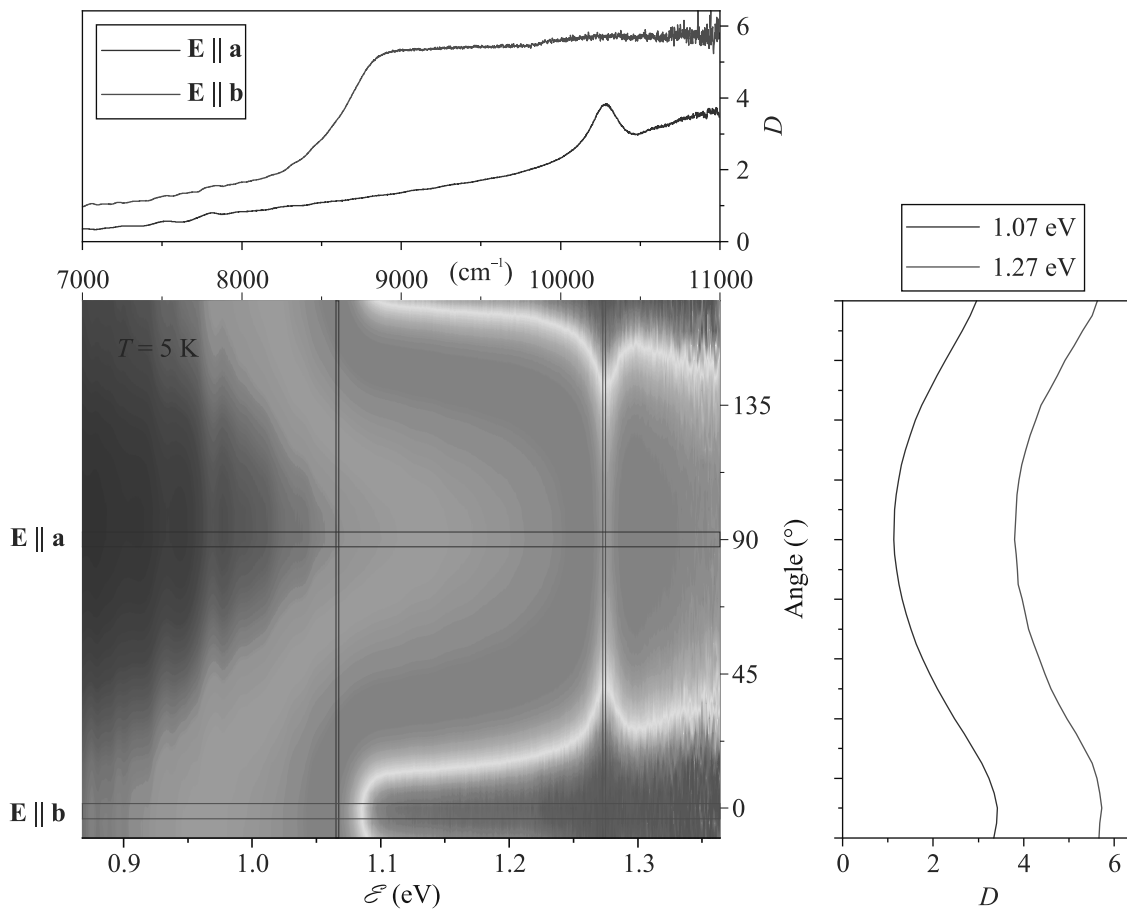


Рис. 4. (Цветной онлайн) Карта оптической плотности монокристалла TiS_3 # 2 при различных направлениях поляризации падающего света (от 0 до 180°) при температуре 5 K. Две горизонтальные линии показывают диапазон усреднения оптической плотности по углам. Сверху – срезы карты интенсивностей. Синий цвет соответствует поляризации поперек вискера ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$), зеленый – вдоль ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$). Шкала энергий общая, приведена в эВ (снизу) и в cm^{-1} (сверху). Справа – угловые зависимости оптической плотности: срезы карты при постоянной энергии при $\mathcal{E} \sim 1.27$ эВ (экситонный пик), и $\mathcal{E} \sim 1.07$ эВ (область края поглощения)

деляется проекцией $\mathbf{E}$ на ось $\mathbf{a}$. Вероятно, небольшой пик при 1.28 эВ, заметный на рис. 3 при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$, связан с неидеальной ориентацией образца # 1 относительно $\mathbf{E}$.

Считая, что при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ край поглощения находится в области 1.4–1.5 эВ (рис. 3a), приходим к заключе-

нию, что максимум поглощения находится по энергии ниже края щели. Так и должно быть, если пик связан с возбуждением экситонов. В этом случае энергия связи экситона определяется как разность $\mathcal{E}_g$ при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ (1.4–1.5 эВ) и энергии экситонной линии (1.28 эВ), что дает оценку 0.1–0.2 эВ.

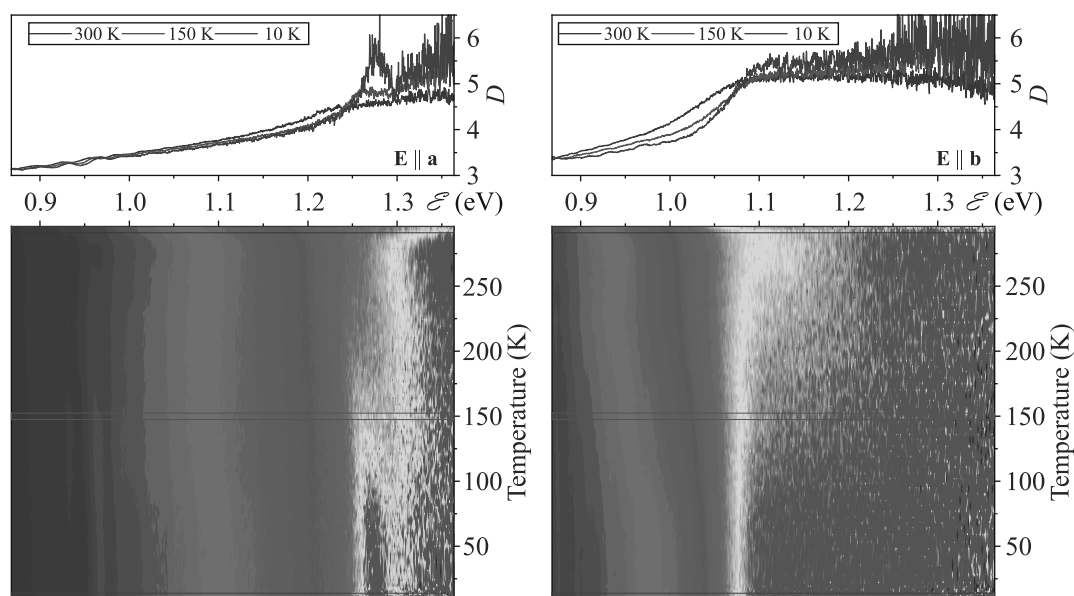


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры оптической плотности образца # 2 в поляризованном свете при разных температурах. Верхние панели: $T = 300, 150$ и 5 К. Нижние панели: температурные карты оптической плотности монокристалла TiS_3 . Слева: $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$. Справа: $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$

Авторы работы [43] при расчете спектров поглощения монослоя TiS_3 из первых принципов получили, что положение и интенсивность экситонной полосы зависит от направления линейной поляризации относительно кристаллографических направлений. В случае поляризации параллельной цепочкам ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$), интенсивность существенно (примерно на порядок) выше, чем в перпендикулярном направлении ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$). Согласно [43] отличаются и энергии связи экситонов: для поляризаций электрического поля параллельно осям $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, они равны 0.59 и 0.68 эВ соответственно. Эти расчеты не соответствуют нашим экспериментальным данным, согласно которым экситонный пик наблюдается только для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$.

В работе [6] сообщается о существенно меньшей по сравнению с [43] энергии связи экситона – 0.130 эВ. Эта величина, полученная как разность туннельной и оптической щелей, близка к нашей экспериментальной оценке.

Ближкие по энергии пики – $1.23, 1.41$ и 1.34 эВ, в зависимости от толщины образца наблюдались в спектрах фотопроводимости нановискеров TiS_3 при 77 К [47]. Авторы также связали эти пики с возбуждением экситонов. Оценки энергии связи экситонов дали еще меньшие значения, $60\text{--}70$ мэВ. При этом, однако, согласно [47], экситонные пики должны быть четко видны лишь при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$, что явно противоречит нашему эксперименту. В то же время при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ на плоском монокристалле толщиной

200 нм в работе [47] наблюдается небольшой пик фотопроводимости как раз при $\mathcal{E} \sim 1.28$ эВ, однако авторы его не обсуждают.

На наш взгляд, появление экситонов именно при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ имеет простое качественное объяснение. Низкие значения проводимости вдоль осей $\mathbf{a}$ и $\mathbf{c}$ при $T < 200$ К [11] могут свидетельствовать о ее прыжковом характере в направлениях поперек цепочек. Если электрон и дырка находятся на разных проводящих цепочках, их рекомбинация потребует преодоления барьера, и, соответственно, их связанное состояние может быть устойчивым. Для возбуждения такого экситона необходима электромагнитная волна с направлением поляризации $\mathbf{E} \perp \mathbf{b}$.

С целью поиска влияния предполагаемых фазовых переходов на поглощение была детально исследована температурная эволюция спектров. На рисунке 5 показаны спектры оптической плотности того же образца, измеренные в поляризованном свете в диапазоне температур $5\text{--}300$ К. Видно, что при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ экситонная полоса становится заметной в районе $150\text{--}200$ К на частоте ~ 10275 cm^{-1} (1.27 эВ). При понижении температуры наблюдается небольшое ее смещение в сторону больших энергий. При этом не видно каких-либо резких изменений в положении, ширине или контрастности полосы в области температур предполагаемых фазовых переходов (15 и 50 К). Примерно при 120 К четко формируется экситонный пик, однако неясно, как он может быть связан с фазовым переходом.

С другой стороны, появление экситонных состояний может приводить к наблюдаемым особенностям транспортных свойств, например, к нелинейной проводимости [52].

Таким образом, нами проведено комплексное исследование оптических свойств монокристаллических вискеро- TiS₃ в широком спектральном и температурном диапазоне. В области дальнего ИК излучения наблюдались неизвестные ранее фононные моды.

Из анализа спектров вблизи края поглощения нельзя сделать однозначный вывод о характере межзонных переходов (см. дополнительные материалы). На вид спектров в области края фундаментального поглощения при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ влияние может оказывать донорный уровень (минизона), находящийся на ~ 40 мэВ ниже дна зоны проводимости (либо края подвижности). При $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ форма края при низких температурах по существу определяется пиком поглощения при 1.28 эВ, который превращается в широкое “плечо” выше ~ 150 К. С учетом этих оговорок мы оцениваем щель при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ величиной $\mathcal{E}_g \approx 1$ эВ при комнатной температуре. При $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ мы считаем, что край поглощения следует определять по началу резкого роста оптической плотности D , что дает $\mathcal{E}_g = 1.4\text{--}1.5$ эВ, т.е. существенно выше, чем при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$.

При понижении температуры до 5 К – значения $\mathcal{E}_g$ возрастают на 40–50 мэВ.

Пик поглощения при 1.28 эВ, наблюдаемый при температурах ниже ~ 150 К, можно объяснить возбуждением экситонов. По нашим оценкам, экситонный уровень оказывается на 0.1–0.2 эВ ниже края щели, что соответствует оценке энергии связи экситона [6]. Интенсивность экситонного пика определяется проекцией электрического поля волны на ось $\mathbf{a}$ кристалла. Возбуждение экситонов именно при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ можно объяснить тем, что при такой поляризации электрон и дырка оказываются на разных проводящих цепочках, т.е. разделены барьером, и их связанное состояние устойчивее, чем в случае возбуждения их на одной цепочке.

При понижении температуры ниже 120 К мы, вплоть до 5 К, не наблюдали значительных изменений в спектрах, указывающих на структурный фазовый переход.

Финансирование работы. Обработка и анализ результатов, а также написание статьи, выполнены В. Я. Покровским при поддержке Российского научного фонда, проект # 22-12-00319. Подготовка кристаллов TiS₃ к исследованиям проводились И. Г. Горловой в рамках Госзадания Института радиотехники и электроники имени

В. А. Котельникова Российской академии наук. Оптические и инфракрасные исследования проводились К. Н. Болдыревым в рамках Госзадания FFUU-2024-004.

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

1. H. G. Grimmeis, A. Rabenau, H. Hann, and P. Neiss, *Z. Electrochem* **65**, 776 (1961) (in German).
2. S. Furuseth, L. Brattas, and A. Kjekshus, *Acta Chem. Scand. A* **29**, 623 (1975).
3. S. Jandl, J. Deslandes, and M. Banville, *Infrared Phys.* **22**, 327 (1982).
4. S. P. Gwet, Y. Mathey, and C. Sourisseau, *Phys. Stat. Sol. (b)* **123**, 503 (1984).
5. H. Yi, T. Komesu, S. Gilbert, G. Hao, A. J. Yost, A. Lipatov, A. Sinitskii, J. Avila, C. Chen, M. C. Asensio, and P. A. Dowben, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 052102 (2018).
6. A. J. Molina-Mendoza, M. Barawi, R. Biele, E. Flores, J. R. Ares, C. Sanchez, G. Rubio-Bollinger, N. Agrait, R. D'Agosta, I. J. Ferrer, and A. Castellanos-Gomez, *Adv. Electron. Mater.* **1**, 1500126 (2015).
7. E. Finkman and B. Fisher, *Solid State Commun.* **50**, 25 (1984).
8. I. G. Gorlova, S. G. Zybtshev, V. Ya. Pokrovskii, N. B. Bolotina, S. Yu. Gavrilkin, A. Yu. Tsvetkov, and A. N. Titov, *Physica B* **460**, 11 (2015).
9. A. S. Shkvarin, Yu. M. Yarmoshenko, M. V. Yablonskikh, A. I. Merentsov, and A. N. Titov, *Journal of Structural Chemistry* **55**, 1039 (2014).
10. S. J. Gilbert, H. Yi, T. Paudel, A. Lipatov, A. J. Yost, A. Sinitskii, E. Y. Tsymbal, J. Avila, M. C. Asensio, and P. A. Dowben, *J. Phys. Chem. C* **126**, 17647 (2022).
11. И. Г. Горлова, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 281 (2014).
12. J. Dai and X. C. Zeng, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 7572 (2015).
13. И. Г. Горлова, В. Я. Покровский, С. Ю. Гаврилкин, А. Ю. Цветков, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 180 (2018).
14. J. O. Island, R. Biele, M. Barawi, J. M. Clamagirand, J. R. Ares, C. Sanchez, H. S. J. van der Zant, I. J. Ferrer, R. D'Agosta, and A. Castellanos-Gomez, *Sci. Rep.* **6**, 22214 (2016).
15. S. Liu, W. Xiao, M. Zhong, L. Pan, X. Wang, H.-X. Deng, J. Liu, J. Li, and Z. Wei, *Nanotechnology* **29**, 184002 (2018).
16. S. Hou, Z. Guo, J. Yang, Y.-Y. Liu, W. Shen, C. Hu, Sh. Liu, H. Gu, and Z. Wei, *Small* **17**, 2100457 (2021).
17. A. Khatibi, R. H. Godiksen, S. B. Basuvalingam, D. Pellegrino, A. A. Bol, B. Shokri, and A. G. Curto, *2D Mater.* **7**, 015022 (2020).
18. И. Г. Горлова, В. Я. Покровский, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 320 (2009).

19. J. O. Island, A. J. Molina-Mendoza, M. Barawi, R. Biele, E. Flores, J. M. Clamagirand, J. R. Ares, C. Sanchez, H. S. J. van der Zant, R. D'Agosta, I. J. Ferrer, and A. Castellanos-Gomez, *2D Mater.* **4**, 022003 (2017).
20. И. Г. Горлова, А. В. Фролов, А. П. Орлов, В. Я. Покровский, Воей Бу Пай, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 400 (2019).
21. M. Randle, A. Lipato A. Kumar et al. (Collaboration), *ACS Nano* **13**, 803 (2019).
22. N. Tripathi, V. Pavelyev, P. Sharma, S. Kumar, A. Rymzhina, and P. Mishra, *Materials Science in Semiconductor Processing* **127**, 105699 (2021).
23. J. Kang and L.-W. Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 14805 (2016).
24. J. Kang, H. Sahin, and F. M. Peeters, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 27742 (2015).
25. M. Li, J. Dai, and X. C. Zeng, *Nanoscale* **7**, 15385 (2015).
26. S. Ho Suk, S. Nah, M. Sajjad, S. B. Seo, J. Song, N. Singh, and S. Sim, *Adv. Optical Mater.* **11**, 2300370 (2023).
27. Y. Jin, X. Li, and J. Yang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 18665 (2015).
28. S. Zhao, B. Dong, H. Wang, H. Wang, Y. Zhang, Z. V. Han, and H. Zhang, *Nanoscale Adv.* **2**, 109 (2020).
29. F. Xia, H. Wang, and Y. Jia, *Nat. Commun.* **5**, 4458 (2014).
30. I. J. Ferrer, J. R. Ares, J. M. Clamagirand, M. Barawi, and C. Sanchez, *Thin Solid Films* **535**, 398 (2013).
31. M. Abdulsalam and D. P. Joubert, *Phys. Status Solidi B* **253**, 868 (2016).
32. M. D. Randle, A. Lipatov, I. Mansaray, J. E. Han, A. Sinitskii, and J. P. Bird, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 210502 (2021).
33. P. Monceau, *Adv. Phys.* **61**, 325 (2012).
34. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, *ФТТ* **6**, 2791 (1964).
35. W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 439 (1967).
36. I. G. Gorlova, S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, N. B. Bolotina, I. A. Verin, and A. N. Titov, *Physica B* **407**, 1707 (2012).
37. Z. Jiang, Y. Li, Sh. Zhang, and W. Duan, *Phys. Rev. B* **98**, 081408(R) (2018).
38. I. G. Gorlova, S. A. Nikonov, S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, and A. N. Titov, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 153102 (2022).
39. А. С. Шкварин, Ю. М. Ярмошенко, М. В. Яблонских, А. И. Меренцов, А. Н. Титов, *ЖСХ* **55**, 1095 (2014).
40. S. K. Srivastava and B. N. Avasthi, *J. Mater. Sci.* **27**, 3693 (1992).
41. Н. Б. Болотина, И. Г. Горлова, И. А. Верин, А. Н. Титов, А. В. Аракчеева, *Кристаллография* **61**, 888 (2016).
42. I. N. Trunkin I. G. Gorlova, N. B. Bolotina, V. I. Bondarenko, Y. M. Chesnokov, and A. L. Vasiliev, *J. Mater. Sci.* **56**, 2150 (2021).
43. E. Torun, H. Sahin, A. Chaves, L. Wirtz, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **98**, 075419 (2018).
44. J. I. Pankove, *Optical processes in semiconductors*, 2nd ed., Publisher New York, Dover (1975).
45. O. Gorochov, A. Katty, N. Le Nagard, C. Levy-Clement, and D. M. Schleich, *Mater. Res. Bull.* **18**, 111 (1983).
46. I. J. Ferrer, M. D. Macia, V. Carcelen, J. R. Ares, and C. Sanchez, *Energy Procedia* **22**, 48 (2012).
47. Z. Lian, Z. Jiang, T. Wang, M. Blei, Y. Qin, M. Washington, T.-M. Lu, S. Tongay, Sh. Zhang, and S.-F. Shi, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 073101 (2020).
48. J. Wu, D. Wang, H. Liu, W.-M. Lau, and L.-M. Liu, *RSC Adv.* **5**, 21455 (2015).
49. R. Biele, E. Flores, J. R. Ares, C. Sanchez, I. J. Ferrer, G. Rubio-Bollinger, A. Castellanos-Gomez, and R. D'Agosta, *Nano Res.* **11**, 225 (2018).
50. F. Iyikanat, H. Sahin, R. T. Senger, and F. Peeters, *J. Phys. Chem. C* **119**, 19, 10709 (2015).
51. E. Flores, J. R. Ares, I. J. Ferrer, and C. Sanchez, *Phys. Status Solidi RRL* **10**, 802 (2016).
52. Y. Takahide, T. Konoike, K. Enomoto, M. Nishimura, T. Terashima, Sh. Uji, and H. M. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 136602 (2006).

Матрица корреляций градиентов фазы световой волны как способ измерения основных параметров турбулентности

В. А. Богачев⁺, И. В. Колоколов^{*×1)}, В. В. Лебедев^{*×}, Ф. А. Стариков^{+°}

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

^{*} Институт теоретической физики имени Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

[×] Научно-исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия

[°] Саровский физико-технический институт – филиал Научно-исследовательского ядерного университета
Московский инженерно-физический институт, 607186 Саров, Россия

Поступила в редакцию 30 августа 2024 г.

После переработки 11 сентября 2024 г.

Принята к публикации 14 сентября 2024 г.

Дифракция световой волны на флуктуациях показателя преломления в турбулентной среде приводит к ее искажениям. Их анализ позволяет извлечь основные параметры турбулентности. В настоящей работе мы предлагаем новый метод, основанный на измерениях корреляционной функции градиентов фазы световой волны, который позволяет независимо находить параметр Фрида r_0 и затем внешний масштаб турбулентности L_0 . Метод успешно протестирован на данных измерений, полученных при прохождении лазерного излучения через газовую среду с искусственно созданной турбулентностью.

DOI: 10.31857/S0370274X24100174, EDN: HNWVWF

Световая волна, распространяющаяся в турбулентной атмосфере, испытывает дифракцию на флуктуациях показателя преломления, которые обусловлены хаотическими турбулентными пульсациями. Физические эффекты, связанные с этой случайной дифракцией, интенсивно изучались во второй половине XX в. Итоги этих исследований подведены в ряде монографий [1–6], где можно найти основные полученные результаты.

Проблема измерения параметров атмосферной турбулентности в астрономических наблюдениях имеет давнюю и отнюдь не завершенную историю. Одной из основных характеристик системы является внешний масштаб L_0 [7], на котором происходит возбуждение движений газа. К сожалению, эта величина не может быть непосредственно извлечена из данных оптических измерений. Первым шагом в их обработке является определение параметра (радиуса) Фрида r_0 [8], представляющего собой длину, на которой нарушается когерентность фазы падающей на измерительный прибор электромагнитной волны. Извлечение же внешнего масштаба турбулентности является следующим шагом, требующим измерений деталей корреляционной функции фазы.

Существует несколько способов оценки параметра Фрида. Прямым методом является измерение дис-

персии изображения звезды [9]. Этот метод осложняется неизбежным дрожанием как фотоприемного устройства, так и зеркала телескопа, что вызывает появление паразитного общего (глобального) наклона волнового фронта. Преодолеть эту проблему позволяет так называемая DIMM-методика (Differential Image Motion Monitor) [10, 11], основанная на определении дисперсии разности локальных градиентов фазы в двух субапертурах. Эта методика требует привлечения информации об оптической системе и не позволяет выделить глобальный наклон волнового фронта, обусловленный крупномасштабными турбулентными флуктуациями.

В принципе радиус Фрида r_0 и внешний масштаб турбулентности L_0 можно определить по размеру длинноэкспозиционного изображения звезды на двух длинах волн [12]. Однако сделать это непросто в традиционных условиях слабого сигнала, да и дрожание аппаратуры существенно влияет на размер изображения. Оценка последнего эффекта является отдельной нетривиальной задачей. В настоящей работе мы предлагаем способ измерения параметра Фрида, не чувствительный к указанным проблемам.

Мы изучаем распространение монохроматической световой волны в турбулентной среде. Такую волну можно возбудить при помощи лазерного источника. Все характерные масштабы задачи (размер волнового пучка, длина его распространения) пред-

¹⁾ e-mail: igor.kolokolov@gmail.com

полагаются значительно превышающими длину волны света λ , так что применимо описание волны в терминах комплексной огибающей Ψ . Величина $|\Psi|^2$ дает интенсивность волны, а фаза Ψ определяет конфигурацию волнового фронта.

Из-за большого значения скорости света можно считать, что состояние среды не меняется за время распространения волны, и использовать стационарное приближение для описания ее огибающей, т.е. считать Ψ функцией координаты z в направлении распространения волны и двумерного радиус-вектора $\mathbf{r} = (x, y)$ в плоскости, перпендикулярной направлению распространения волны. В принятом приближении огибающая Ψ адиабатически подстраивается под текущее состояние среды, которое хаотически меняется со временем.

Мы считаем интенсивность электромагнитной волны достаточно малой для того, чтобы нелинейные эффекты были несущественными. Тогда уравнение для огибающей $\Psi(\mathbf{r}, z)$ линейно и имеет параболический вид:

$$i\partial_z \Psi + \frac{1}{2k_0}(\partial_x^2 + \partial_y^2)\Psi + k_0 n_1 \Psi = 0, \quad (1)$$

где k_0 – волновой вектор, а n_1 – отклонение показателя преломления среды от своего равновесного значения. Поле n_1 является случайным и должно характеризоваться статистически.

Флуктуации коэффициента преломления n_1 вызываются турбулентными пульсациями и связаны с изменениями плотности среды. Вследствие этого статистика n_1 может быть пересчитана из статистики флуктуаций температуры. В соответствии с теорией Колмогорова–Обухова [13–15] для расстояний из инерционного интервала структурная функция показателя преломления может быть записана следующим образом:

$$\langle [n_1(x, y, z) - n_1(0, 0, 0)]^2 \rangle = C_n^2 (x^2 + y^2 + z^2)^{1/3}, \quad (2)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по времени. Фактор C_n^2 в выражении (2) характеризует мощность флуктуаций показателя преломления среды, а степень $1/3$ отражает колмогоровский показатель спектра скорости турбулентной среды.

Для светового пучка, распространяющегося вдоль оси Z , флуктуации показателя преломления n_1 эффективно коротко коррелированы вдоль этой оси из-за большой скорости света. Поэтому зависимость от z в парной корреляционной функции n_1 можно аппроксимировать дельта-функцией:

$$\langle n_1(\mathbf{r}, z) n_1(\mathbf{0}, 0) \rangle \rightarrow \delta(z) C_n^2 \mathcal{A}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Вообще говоря, фактор C_n^2 в выражении (3) является функцией координаты z . Например, фактор C_n^2 существенно меняется с высотой при вертикальном распространении луча в атмосфере.

Функция $\mathcal{A}$ в соотношении (3) может быть выражена через пространственный спектр скорости $\Phi(k)$:

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) \propto \int d^2 k \Phi(k) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (4)$$

В качестве примера можно рассмотреть спектр фон Кармана $\Phi \propto (k^2 + \kappa^2)^{-11/6}$ [16], где κ имеет смысл обратного внешнего масштаба турбулентности. В этом случае интеграл (4) берется явно, он выражается через функцию Макдональда $K_{5/6}(\kappa r)$. Мы интересуемся случаем, когда расстояние r лежит в инерционном интервале масштабов. Тогда r много меньше внешнего масштаба турбулентности, т.е. $\kappa r \ll 1$. Удерживая главные члены разложения функции $K_{5/6}(\kappa r)$ по малому параметру κr , мы находим

$$\mathcal{A} \approx 0.7818 \kappa^{-5/3} - 1.4572 r^{5/3} + 1.1727 \kappa^{1/3} r^2. \quad (5)$$

При выводе (5) коэффициент пропорциональности в соотношении (4) был выбран в соответствии с выражением (2) для структурной функции флуктуаций показателя преломления.

В выражении (5) имеется вклад $\propto r^{5/3}$, обусловленный флуктуациями с $k \sim r^{-1}$. Остальные члены в выражении (5) обусловлены длинноволновыми флуктуациями с волновыми векторами $k \sim \kappa$. В случае произвольной турбулентности эти два члена сохраняют свою зависимость от $\mathbf{r}$, поскольку являются первыми членами разложения в ряд Тейлора по $\mathbf{r}$ длинноволновой части интеграла (4). Однако коэффициенты перед степенями $\mathbf{r}$ в общем случае не связаны между собой так, как в случае спектра фон Кармана. Мы будем использовать следующее выражение:

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \text{const} - 1.4572 r^{5/3} + 1.1727 (2\pi/L_0)^{1/3} r^2, \quad (6)$$

где длина L_0 имеет смысл внешнего масштаба турбулентности. Для спектра фон Кармана $L_0 = 2\pi/\kappa$. Стоящая в выражении (6) константа имеет порядок $L_0^{5/3}$. Коэффициент при $r^{5/3}$ в выражении (6) такой же, как и в (5), он определяется видом структурной функции (2). Выражение (6) справедливо для инерционного интервала, когда $r \ll L_0$. В этом случае последний член в правой части (6) много меньше второго.

Следствием уравнения (1) на огибающую Ψ является уравнение на ее фазу φ

$$-\partial_z \varphi + \frac{1}{2k_0|\Psi|} \nabla^2 |\Psi| - \frac{1}{2k_0} (\nabla \varphi)^2 + k_0 n_1 = 0, \quad (7)$$

где $|\Psi|$ – абсолютное значение огибающей. Для широкого пучка членом с $|\Psi|$ в уравнении (7) можно пренебречь. Пренебрегая также членом с $(\nabla \varphi)^2$ в уравнении (7), мы приходим к уравнению, которое имеет следующее решение:

$$\varphi(\mathbf{r}, z) = k_0 \int^z d\zeta n_1(\mathbf{r}, \zeta). \quad (8)$$

Выражение (8) соответствует приближению тонкой атмосферы, или иначе, приближению слабых сцинтилляций.

Мы интересуемся статистикой фазы φ на приемнике. Тогда интеграл в выражении (8) берется вдоль траектории луча от источника до измерительной системы. Парная корреляционная функция фазы φ (8) выражается через параметр Фрида r_0 [8], который вводится в соответствии с определением

$$r_0^{-5/3} = 0.423 k_0^2 \int d\zeta C_n^2(\zeta), \quad (9)$$

используемым для нормального падения волны на вход измерительной системы. Параметр Фрида r_0 имеет смысл расстояния между точками, для которых дисперсия разности флуктуационной фазы порядка единицы. Как следствие соотношений (3), (6), (8), находим:

$$\langle \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \rangle = \text{const} - 3.44 (r/r_0)^{5/3} [1 - 1.485(r/L_0)^{1/3}], \quad (10)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Установим условие применимости приближения тонкой атмосферы. Для этого следует оценить вклад в уравнение (7) отброшенного члена с $(\nabla \varphi)^2$. Как следует из выражения (10), разность фаз для точек, разделенных расстоянием r , становится порядка единицы при $r \sim r_0$. При этом градиент фазы оценивается как r_0^{-1} . Сравнивая $\partial_z \varphi$ и $k_0^{-1}(\nabla \varphi)^2$ и требуя, чтобы второй член был много меньше первого, мы находим неравенство:

$$k_0 r_0^2 \gg z. \quad (11)$$

В случае сильно стратифицированной среды в неравенстве (11) должна стоять эффективная толщина, на которой набирается интеграл (9). Неравенство (11) означает, что мала так называемая дисперсия Рытова. Условие широкого лазерного луча можно записать в виде $R \gg r_0$, где R – радиус пучка.

Далее мы изучаем статистику градиента фазы $\nabla \varphi$, который определяет локальный наклон волнового фронта $k_0^{-1} \nabla \varphi$. Вводим обозначение для корреляционной функции градиентов фазы:

$$Q_{\alpha\beta} = \langle \partial_\alpha \varphi(\mathbf{r}_1) \partial_\beta \varphi(\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (12)$$

Греческие индексы в выражении (12) и ниже пробегают значения x, y . Функцию (12) можно найти дифференцируя выражение (10):

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{3.44}{r_0^{5/3} r^{1/3}} \left(\frac{5}{3} \delta_{\alpha\beta} - \frac{5r_\alpha r_\beta}{9r^2} \right) - \frac{10.2}{r_0^{5/3} L_0^{1/3}} \delta_{\alpha\beta}, \quad (13)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Недиагональная компонента корреляционной функции (13) равна

$$Q_{xy} = -\frac{1.91 xy}{r_0^{5/3} r^{7/3}}. \quad (14)$$

Она не зависит от внешнего масштаба турбулентности L_0 и определяется только параметром Фрида r_0 . Таким образом, измерения Q_{xy} могут служить для прямого определения этого параметра. Приведем также выражение для следа матрицы (13):

$$Q = (Q_{xx} + Q_{yy})/2 = \frac{1}{r_0^{5/3}} \left(\frac{4.78}{r^{1/3}} - \frac{10.2}{L_0^{1/3}} \right). \quad (15)$$

Заметим, что в принятом нами приближении Q зависит только от r .

Дрожание измерительной системы приводит к искажениям сигнала, которые эквивалентны глобальным наклонам волнового фронта с углами, случайно меняющимися со временем. В результате в корреляционной функции градиентов фазы (12) возникает дополнительный положительный, не зависящий от $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ вклад, который эффективно перенормирует L_0 в выражении (13) в сторону его увеличения. Таким образом, дрожание аппаратуры приводит к ошибкам в измерении L_0 . В то же время дрожание аппаратуры не затрагивает недиагональный член Q_{xy} в корреляционной функции (12). Поэтому значение параметра Фрида r_0 , извлеченное из выражения (14), оказывается нечувствительным к этому эффекту.

При обработке экспериментальных данных применяется способ коррекции, который заключается в вычитании из измеренных градиентов фазы $\partial_\alpha \varphi$ их среднего значения. Физически это означает исключение глобального наклона волнового фронта. Для входной апертуры радиуса R эта процедура означает замену $\partial_\alpha \varphi$ на

$$\partial_\alpha \phi = \partial_\alpha \varphi - \frac{1}{\pi R^2} \int d^2 r \partial_\alpha \varphi, \quad (16)$$

где интегрирование идет по входной апертуре (кругу радиуса R). Из выражения (16) выпадают глобальные наклоны. Поэтому эта величина нечувствительна к дрожанию прибора. Она нечувствительна также

и к наклонам волнового фронта, которые генерируются на масштабе L_0 , если L_0 больше R .

Рассмотрим парную корреляционную функцию градиентов скорректированной фазы ϕ (16) с раздвижкой между точками $\mathbf{r}$ много меньше R и усредним ее по апертуре. Эта величина может быть найдена из (13). В главном приближении:

$$\bar{Q}_{\alpha\beta} = \int \frac{d^2 r_1}{\pi R^2} \langle \partial_\alpha \phi(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}/2) \partial_\beta \phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}/2) \rangle \approx \frac{3.44}{r_0^{5/3} r^{1/3}} \left(\frac{5}{3} \delta_{\alpha\beta} - \frac{5r_\alpha r_\beta}{9r^2} \right) - \frac{5.32}{r_0^{5/3} R^{1/3}} \delta_{\alpha\beta}. \quad (17)$$

Это выражение заменяет (12).

Таким образом, в данном случае роль L_0 берет на себя радиус апертуры R , а недиагональный член в корреляционной функции сохраняет свой вид. Поэтому параметр Фрида можно извлечь из этого недиагонального члена и после вычитания глобального наклона волнового фронта. Из выражения (17) следует формула:

$$\bar{Q} = (\bar{Q}_{xx} + \bar{Q}_{yy})/2 = \frac{1}{r_0^{5/3}} \left(\frac{4.78}{r^{1/3}} - \frac{5.32}{R^{1/3}} \right), \quad (18)$$

для следа матрицы $\bar{Q}$ для скорректированной фазы.

Мы проанализировали экспериментальные данные, полученные на стенде замкнутой адаптивной оптической системы, описанной в работе [17]. Схема установки приведена на рис. 1. Турбулентность искусственно создавалась вентилятором (между позициями 2 и 3 на рис. 1). Вентилятор располагался в 50 см от лазерного пучка и имел размер лопастей 13 см. Таким образом, внешний масштаб турбулентности существенно превышал ширину лазерного пучка, равную 4.5 см. Поток газа от вентилятора был направлен поперек пучка.

Мы использовали данные, полученные с помощью лазерного излучения с длиной волны $\lambda = 0.65$ мкм. Параметры прошедшего турбулентную трассу излучения измерялись с помощью датчика волнового фронта Шака-Гартмана. Датчик имел следующие параметры: размерность раstra микролинз 20×20 , фокусное расстояние микролинзы $f = 12$ мм, диаметр микролинзы – 0.25 мм, размер пикселя камеры прибора с зарядовой связью (ПЗС) – 10 мкм. Частота записи кадров гартманнограмм равнялась 1500 Гц, длительность записи равнялась 20 с. Перед датчиком находился телескоп (между 5 и 10 на рис. 1), уменьшающий апертуру пучка.

Результатом измерения является гартманнограмма, т.е. матрица пятен, каждое из которых находится

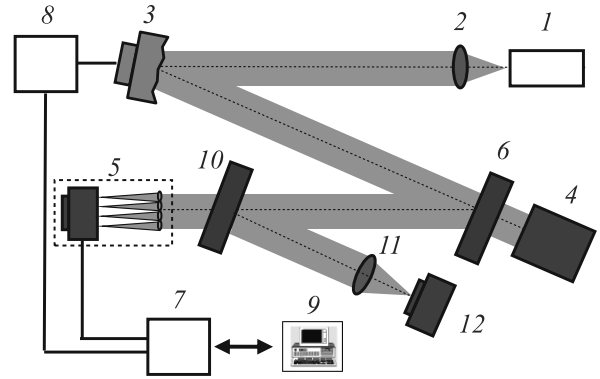


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема оптической системы [17]: 1 – лазер; 2, 11 – линза; 3 – адаптивное зеркало; 4 – потребитель; 5 – датчик волнового фронта (ДВФ) Шака-Гартмана; 6, 10 – светоделитель; 7 – программируемая вентиляционная матрица; 8 – блок управления; 9 – компьютер; 12 – КМОП камера

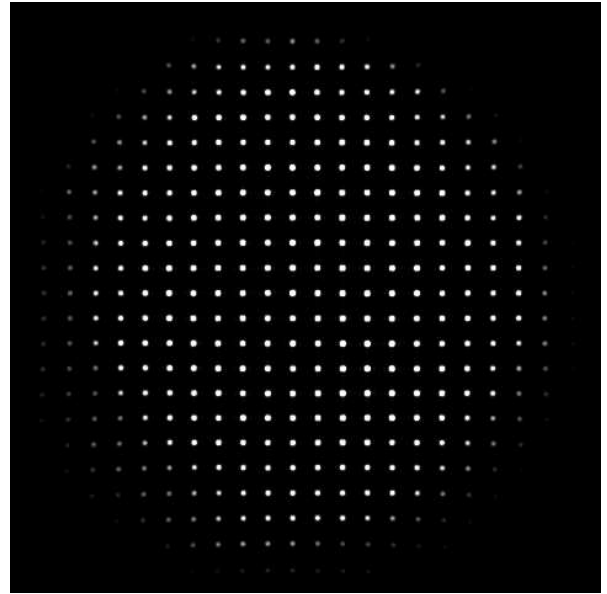


Рис. 2. Типичная гартманнограмма

в пределах своей субапертуры и сдвинуто от ее оси из-за локального наклона волнового фронта. Одна из полученных гартманнограмм показана на рис. 2. Локальные углы наклона волнового фронта даются отношениями $\Delta x/f$, $\Delta y/f$, где Δx , Δy – сдвиги пятен вдоль осей X и Y , а f – фокусное расстояние микролинзы. Пересчитывая эти углы в градиенты фазы, находим:

$$\partial_x \varphi = k_0 \Delta x / f, \quad \partial_y \varphi = k_0 \Delta y / f. \quad (19)$$

Данные соотношения позволяют извлекать градиенты фазы на входе в телескопическую систему.

В работах [17, 18] были получены спектры флуктуаций фазы на входе телескопической системы. Спектры содержат степенные участки с колмогоровским показателем, соответствующие инерционному интервалу. Таким образом, при анализе экспериментальных данных мы можем воспользоваться теоретическими соотношениями, представленными выше.

Из серии экспериментальных гартманнограмм извлекается корреляционная функция градиентов фазы Q_{xy}^{exp} (12), найденных в соответствии с выражениями (19). Раздвижка между точками $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ выбиралась заметно меньше размеров матрицы пятен. Помимо усреднения по времени, при фиксированном $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ производилось усреднение по матрице пятен, которое является дискретным аналогом усреднения по кругу, см. (17). Результат приведен на рис. 3а. На рисунке 3б показано аналогичное распределение, полученное при исключении средних наклонов волнового фронта. Процедура является дискретным аналогом соотношения (16). Для сравнения на рис. 3с приведена корреляционная функция, построенная в соответствии с аналитическим выражением (14).

Значение параметра Фрида, соответствующее эксперименту, можно извлечь, например, вычислив безразмерную величину

$$\eta = \int dx dy (Q_{xy}^{\text{exp}} - Q_{xy})^2 \left[\int dx dy (Q_{xy})^2 \right]^{-1}, \quad (20)$$

где Q_{xy} определяется формулой (14). Интегралы в (20) аппроксимируются суммами по квадрату 7×7 субапертур (с исключением центральной субапертуры), размер которого заметно меньше размеров матрицы пятен.

Полученная в соответствии с определением (20) функция $\eta(r_0)$ приведена на рис. 4, сплошная линия. Она имеет минимум при некотором значении r_0 , которое и определяет экспериментальное значение параметра Фрида r_0^{exp} . В нашем случае минимальное значение η достигается при $r_0^{\text{exp}} = 0.7$ см. Отметим, что получившееся значение r_0 оказывается существенно меньше ширины лазерного пучка (около 4.5 см), что оправдывает приближение широкого пучка.

Для сравнения на том же рис. 4 приведена штриховая линия, которая получается, если вместо экспериментальных значений Q_{xy}^{exp} подставить “идеальную” функцию, т.е. (14) при $r_0 = r_0^{\text{exp}}$, что дает $\eta = [1 - (r_0/r_0^{\text{exp}})^{5/3}]^2$. Мы заключаем, что кривые близки, разница же обусловлена как грубостью пространственного разрешения в эксперименте, так и неколмогоровскими нюансами созданной турбулент-

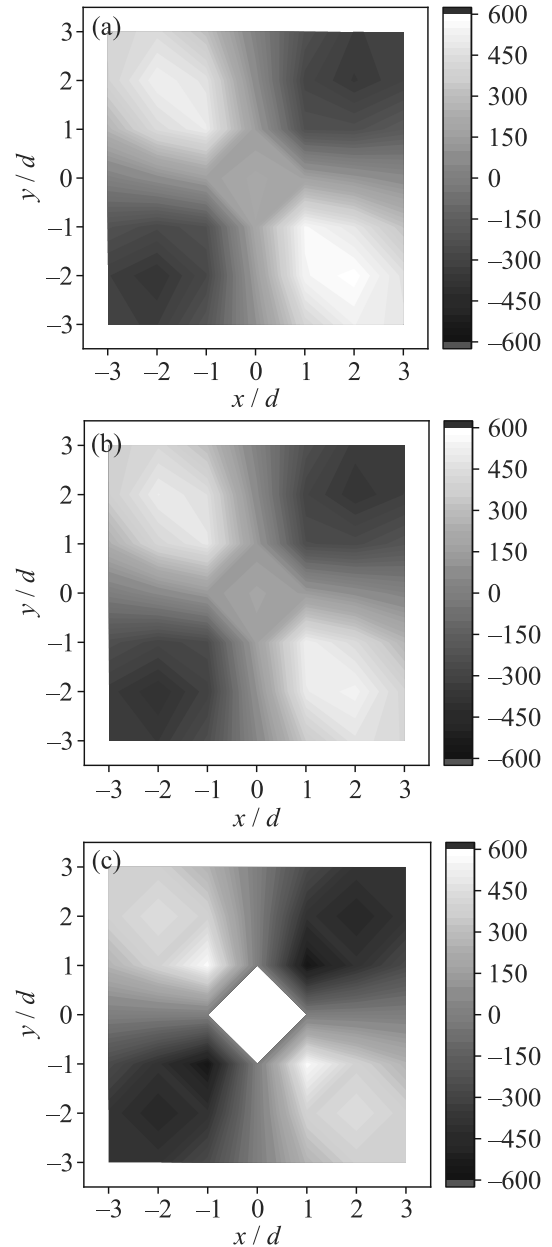


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Извлеченная из измерений недиагональная корреляционная функция Q_{xy} в $\text{рад}^2/\text{см}^2$, d – размер субапертуры ДВФ; (б) – То же после исключения средних наклонов волнового фронта; (с) – Аналитическое выражение (14)

ности. В принципе, по отличию экспериментального профиля от “идеального” можно судить о тех или иных отклонениях характера изучаемой турбулентности от колмогоровского поведения.

Ту же процедуру можно проделать при исключенном глобальном наклоне волнового фронта. На рисунке 4 штрих-пунктиром показана функция η , полученная с вычитанием среднего наклона волно-

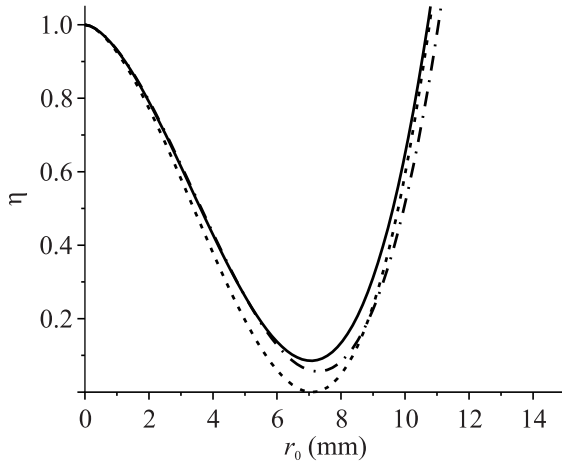


Рис. 4. Зависимость $\eta(r_0)$ (сплошная линия), извлеченная из экспериментальных данных. Штрихпунктирная кривая представляет функцию $\eta(r_0)$, полученную после вычитания глобального наклона. Штриховая линия представляет “идеальную” кривую $\eta(r_0)$

вого фронта. Значения с наклонами и без наклонов, вычисленные по производной функции η по r_0 , отличаются всего на 1 %. Результат находится в соответствии с теорией, поскольку устранение среднего наклона означает переход от выражения (13) к выражению (17), недиагональные компоненты в которых совпадают.

Полученное значение радиуса Фрида r_0 можно использовать для проверки условия применимости модели тонкой атмосферы (слабых сцинтилляций) (11). Подставляя в левую часть этого выражения $r_0 = 0.7$ см, $k_0 = 2\pi/\lambda \approx 10^5$ см⁻¹, мы находим $k_0 r_0^2 \approx 5 \cdot 10^4$ см, что заведомо много больше длины трассы лазерного пучка в турбулентном газе. Таким образом, условие (11) выполняется.

Сопоставим предложенный нами способ измерения параметра Фрида и традиционную DIMM-методику. Величина, которая получается из тех же экспериментальных данных по DIMM-методике, равна 0.85 см, что находится в разумном согласии с найденной нами величиной параметра Фрида 0.7 см. Подчеркнем, что, в отличие от DIMM-методики, наш метод не требует привлечения информации о параметрах оптической системы и дифракционного размера пятна.

Следующим шагом в нашей работе является извлечение внешнего масштаба турбулентности L_0 из экспериментальных данных. Вся измерительная установка была смонтирована на массивном оптическом столе, что исключает вибрации аппаратуры. Поэтому при обработке данных мы используем выражение (13), игнорируя вибрации.

Удобно использовать экспериментальные данные для величины $Q = (Q_{xx} + Q_{yy})/2$. Процедура извлечения L_0 из экспериментальных данных заключается в следующем. Мы находим значения Q^{exp} внутри того же квадрата 7×7 субапертур, а затем по аналогии с (20) составляем безразмерную величину

$$\mu = \int dx dy (Q^{\text{exp}} - Q)^2 \left[\int dx dy Q^2 \right]^{-1}, \quad (21)$$

где Q определяется выражением (15) со значением $r_0 = 0.7$ см, найденным ранее. В результате μ становится функцией L_0 . Эта функция, построенная по экспериментальным данным, приведена на рис. 5. Минимум этой функции определяет экспериментальное значение $L_0^{\text{exp}} = 24$ см. Полученное значение находится в разумном согласии с условиями возбуждения турбулентности, описанными выше.

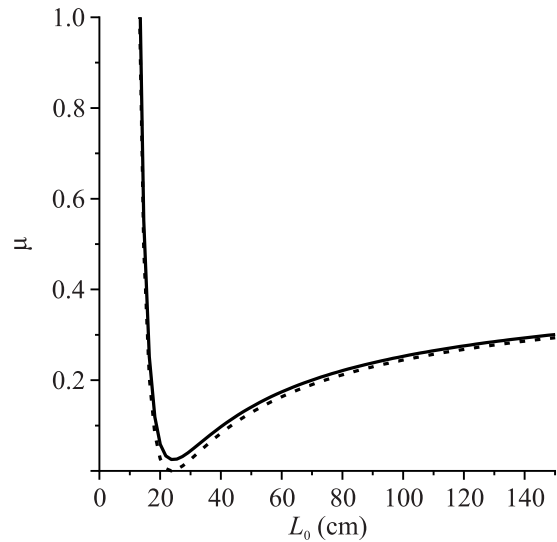


Рис. 5. Функция $\mu(L_0)$ (21), построенная по экспериментальным данным. Штриховая линия представляет “идеальную” кривую, которая получается при подстановке в формулу (21) вместо Q^{exp} выражения (15) с $L_0 = L_0^{\text{exp}}$

Представляет интерес проанализировать данные с вычтенным глобальным наклоном. По формуле (21), где вместо Q^{exp} стоит $\bar{Q}^{\text{exp}}$, а вместо Q стоит выражение (18 для $\bar{Q}$, мы вычисляем функцию $\mu(R)$, представленную на рис. 6. Минимум этой функции определяет экспериментальное значение $R^{\text{exp}} = 2.1$ см, которое находится в разумном согласии с радиусом пучка 2.2 см.

В данной работе развит метод определения параметра Фрида r_0 , основанный на измерениях недиагональной компоненты корреляционной функции градиентов фазы падающего на измерительную систему лазерного излучения. Метод позволяет незави-

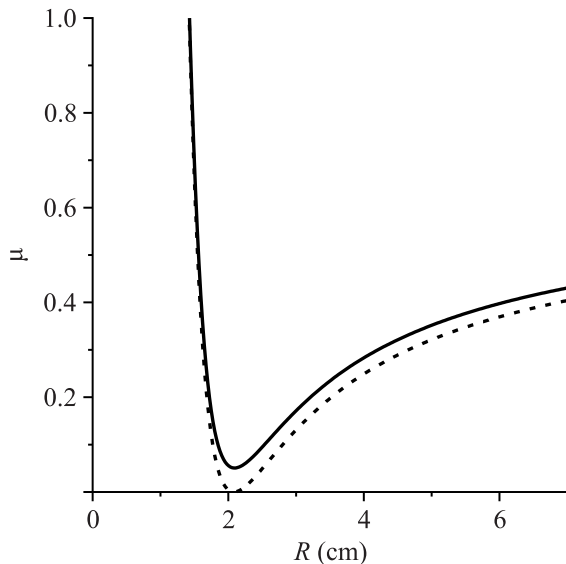


Рис. 6. Функция $\mu(R)$ (21), построенная по экспериментальным данным $\bar{Q}^{\text{exp}}$ с исключенным глобальным наклоном и выражением (18) вместо Q . Штриховая линия представляет “идеальную” кривую, которая получается при подстановке в формулу (21) вместо $\bar{Q}^{\text{exp}}$ выражения (18) с $R = R^{\text{exp}}$

симо определить r_0 и оказывается нечувствителен к наличию глобального наклона волнового фронта, как турбулентного, так и паразитного. Привлечение диагональной компоненты корреляционной функции градиентов фазы позволяет затем извлекать из экспериментальных данных внешний масштаб турбулентности L_0 . Методика успешно апробирована на данных эксперимента, описание которого приведено в работах [17, 18]. Обработка экспериментальных данных доказала эффективность предложенного метода и позволила извлечь значения r_0 , L_0 , которые находятся в хорошем соответствии с величинами, извлеченными с помощью других методик, и физическими соображениями.

Финансирование работы. Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, проект “Физика высоких плотностей энергии”, этап 2023–2025.

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

1. В. И. Татарский, *Распространение волн в турбулентной атмосфере*, Наука, М. (1967).
2. V. I. Tatarskii, *The Effects of the Turbulence Atmosphere on Wave Propagation*, Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem (1971).
3. J. W. Goodman, *Statistical Properties of Laser Speckle Pattern*, in *Laser Speckle and Related Phenomena*, ed. by J. C. Dainty, Springer-Verlag, Berlin (1975).
4. С. М. Рытов, Ю. А. Кравцов, В. И. Татарский, *Введение в статистическую радиофизику, ч. II, Случайные поля*, Физматлит, М. (1978) [S. M. Rytov, Yu. A. Kravtsov, and V. I. Tatarskii, *Principles of Statistical Radiophysics, part 2*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1988)].
5. J. W. Strohbehn (editor), *Laser Beam Propagation in the Atmosphere*, Springer, N.Y. (1978).
6. L. C. Andrews and R. L. Phillips, *Laser Beam Propagation Through Random Media*, Press Monograph Series, PM **53** (1998).
7. В. П. Лукин, УФН **191**, 292 (2021) [V. P. Lukin, Phys.-Uspekhi **64**, 280 (2021)].
8. D. L. Fried, J. Opt. Soc. Am. **56**, 1372 (1966).
9. P. N. Brandt, H. A. Mauter, and R. Smart, Astron. Astrophys. **188**, 163 (1987).
10. D. L. Fried, Radio Sci. **10**, 71 (1975).
11. M. Sarazin and F. Roddier, Astron. Astrophys. **227**, 294 (1990).
12. A. Tokovinin, Publ. Astron. Soc. Pac. **114**, 1156 (2002).
13. А. Н. Колмогоров, Докл. АН СССР, **30**, 299 (1941).
14. А. Н. Колмогоров, Докл. АН СССР, **32**, 19 (1941).
15. А. М. Обухов, Докл. АН СССР **32**, 22 (1941).
16. T. von Karman, Proceedings of the National Academy of Sciences **34**, 530 (1948).
17. V. N. Belousov, V. A. Bogachev, M. V. Volkov, S. G. Garanin, A. V. Kudryashov, A. N. Nikitin, A. L. Rukosuev, F. A. Starikov, Yu. V. Sheldakova, and R. A. Shnyagin, Quantum Electron. **51**, 992 (2021).
18. В. А. Богачев, М. В. Волков, Ф. А. Стариков, Р. А. Шнягин, Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы. XXX Международный симпозиум. С.-Петербург, Издательство ИОА СО РАН, Томск (2024), с. A255; ISBN 978-5-94458-200-3.

Неравновесный нагрев электронов, плавление и модификация нанопленки никеля ультракоротким импульсом терагерцового излучения

С. И. Ашитков¹⁾, П. С. Комаров, А. В. Овчинников, С. А. Ромашевский, Е. В. Струлева¹⁾, О. В. Чефонов, М. Б. Агранат

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН), 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 2024 г.
После переработки 17 сентября 2024 г.
Принята к публикации 18 сентября 2024 г.

Методом фемтосекундной интерференционной микроскопии с временным разрешением 10^{-13} с проведены исследования динамики изменения оптических свойств пленки никеля толщиной 25 нм на стеклянной подложке при ее возбуждении субпикосекундным импульсом терагерцового излучения с напряженностью поля 11 МВ/см. Результаты измерений комплексного коэффициента отражения и диэлектрической проницаемости в видимом диапазоне спектра свидетельствуют о неравновесном нагреве электронной подсистемы никеля до нескольких тысяч градусов, который сопровождается индуцированным увеличением отражения в момент воздействия и последующим плавлением спустя 5–10 пс. Исследование морфологии модифицированной поверхности методами сканирующей электронной и зондовой микроскопии свидетельствует о локальном плавлении нанопленки и ее деламации от подложки при данном значении напряженности поля.

DOI: 10.31857/S0370274X24100181, EDN: DGSTTT

Введение. В последние годы в связи с появлением новых мощных импульсных источников излучения терагерцового (ТГц) диапазона спектра на основе нелинейных органических кристаллов с высокой напряженностью поля [1–4] повышенный интерес проявляется к изучению их воздействия на различные материалы [5–7], включая наноразмерные металлические пленки, являющиеся компонентами оптики и магнитооптики ТГц диапазона [8, 9]. Данный интерес обусловлен как нелинейным характером взаимодействия [10–12], так и спецификой их разрушения при однократном и многократном воздействии [13–17].

Особенностью ТГц диапазона спектра (1–10 ТГц) является низкая энергия квантов излучения (2.4–24 мэВ). Воздействие такого излучения не является “ионизирующим” для электронных процессов в металлах и полупроводниках и хорошо описывается классической теорией электромагнитных волн. Специфические свойства тонких металлических пленок с толщиной d , много меньшей толщины скин-слоя δ при их взаимодействии с электромагнитным излучением микроволнового и ТГц диапазона, исследуются

давно [18]. Такие пленки имеют максимум поглощения, достигающий 50 %, при критической толщине $d_0 = c/2\pi\sigma$ (диапазон d_0 от единиц до десятков нанометров), зависящей от величины проводимости σ [19, 20]. По мере увеличения толщины при $d > d_0$ пленка начинает эффективно отражать электромагнитное излучение. Причина роста отражения с увеличением толщины заключается в эффекте экранировки, состоящем в интерференции падающего и введенного в образец магнитных полей. В зависимости от параметров металлические нанопленки используются в ТГц диапазоне и как поглощающие элементы детекторов [20], и как отражающие зеркала [9]. Поскольку проводимость нанопленок наряду с толщиной в значительной степени зависит от качества поверхности и степени неоднородности их структуры (соотношение размера зерна и толщины нанопленки) [21], развитие методов диагностики и оптимизации их параметров для конкретных приложений является весьма актуальной.

Особое место здесь занимают магнитные материалы [22], в частности, пленки никеля [8], в которых ТГц излучение, в отличие от оптического, непосредственно влияет на динамику спиновой подсистемы. Современные перспективные магнитные многослойные материалы на основе попеременно уложенных

¹⁾ e-mail: struleva.evgenia@yandex.ru; ashitkov11@yandex.ru; sa.romashevskiy@gmail.com

немагнитных и магнитных металлических слоев толщиной 10–20 нм (в том числе структуры Ni/Al/Ni) ответственны за гигантское магнитное сопротивление (ГМС), которое играет ключевую роль в устройствах магнитной памяти, датчиках и других приложениях спинтроники, в том числе спиновых клапанов с пикосекундным быстродействием [23]. В основе явления ГМС лежит проводимость электронов, управляемая спин-зависимым рассеянием на границах раздела ферромагнитных/немагнитных нанослоев, которая остается мало изученной в ТГц частотной области.

В этом контексте представляется важным проведение экспериментов по воздействию высокоинтенсивного ТГц импульсного излучения на металлические пленки субволновой толщины с целью изучения транспорта энергии между электронной и ионной подсистемами на наномасштабах во временной области. Особенность воздействия ТГц импульсов по сравнению с ультракороткими импульсами (УКИ) оптического или ближнего инфракрасного (ИК) диапазона состоит в существенно более низкой энергии фотонов излучения, близкой к характерным энергиям колебаний решетки.

В работе [10] был проведен теоретический анализ нелинейного воздействия субпикосекундного ТГц импульса с напряженностью поля до 90 МВ/см на нанопленки алюминия. Было показано, что в процессе нагрева металла мощным ультракоротким импульсом ТГц излучения температура электронов проводимости T_e может существенно превышать температуру решетки T_i . При этом существенное увеличение эффективной частоты столкновений электронов при нагреве должно приводить к заметному увеличению коэффициента отражения и пропускающей способности металлической пленки.

В то же время, насколько нам известно, в отличие от экспериментов с воздействием оптических ультракоротких импульсов, о возбуждении двухтемпературного (2Т) состояния с помощью импульсов ТГц диапазона спектра ранее не сообщалось.

Впервые возможность неравновесного нагрева электронов и решетки в металлах была теоретически рассмотрена в работах [24, 25] в связи с экспериментально наблюдаемым отклонением от закона Ома при пропускании через проводник сильного электрического тока [26]. В дальнейшем, в работе [27] была развита двухтемпературная модель, описывающая состояние вещества с $T_e > T_i$, которая до настоящего времени успешно применяется для интерпретации воздействия на металлы УКИ оптического и ИК диапазона спектра [28–30]. В частности, в

экспериментах по измерению термоиндуцированного отражения (TTR – transient thermo reflectance) накоплен обширный материал о параметрах электрон-фононного теплообмена и теплопроводности в условиях неравновесного нагрева УКИ для металлов с различной зонной структурой [31–37]. Важно отметить различие в динамике сигнала TTR для разных длин волн зондирующего излучения, связанное с особенностями зонной структуры металлов [32]. В частности, в ближнем ИК диапазоне специфика оптического отклика Ni [37], в отличие от Au, Al и Pt [33–36], состоит в изменении знака термоиндуцированного отражения ΔR в процессе релаксации температур электронов и решетки. Это позволяет с более высокой степенью надежности идентифицировать возникновение 2Т состояния у Ni по временной динамике коэффициента отражения $\Delta R(t)$.

В настоящей работе с помощью гибридной схемы фемтосекундной интерференционной микроскопии, сочетающей возбуждение исследуемого образца мощным субпикосекундным импульсом ТГц излучения и зондирование фемтосекундными импульсами видимого диапазона, получены новые данные о релаксации энергии между электронной и ионной подсистемами в пленочном образце никеля вблизи порога плавления.

Измеренная временная эволюция коэффициента отражения свидетельствует о возникновении ранее нерегистрируемого в эксперименте неравновесного 2Т состояния с $T_e > T_i$, возбуждаемого импульсом ТГц излучения. Одновременная регистрация изменения амплитуды и фазы зондирующего импульса позволила получить данные о пикосекундной динамике комплексной диэлектрической проницаемости, свидетельствующие о возникновении жидкой фазы на временах $\sim 10^{-11}$ с после воздействия. Проведенные исследования морфологии на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) и атомно-силовом микроскопе (АСМ) показали наличие модификации поверхности нанопленки с существенным увеличением ее шероховатости после нагрева, по-видимому, связанной с эффектом деветинга (dewetting [38]).

Методика и материалы. Генерация импульсов мощного ТГц излучения осуществлялась методом оптического выпрямления фемтосекундных лазерных импульсов, создаваемых хром-форстеритовой лазерной системой с длиной волны излучения $\lambda_1 = 1240$ нм и длительностью 100 фс, в нелинейном органическом кристалле DSTMS диаметром 8 мм. Измерения проводились в закрытом корпусе с относительной влажностью воздуха менее 5%. Для фильтрации излучения лазерной накачки после кри-

сталла был установлен отрезающий ТГц фильтр (LPF8.8-47, Tydex). Коэффициент ослабления фильтра на длине волны излучения 1240 нм составлял величину не менее 10^5 .

На рисунке 1 приведена оптическая схема фемтосекундной интерференционной микроскопии, предназначенная для изучения пикосекундной динамики изменения оптических свойств нанопленок с временным и пространственным разрешением. Отличительной особенностью данной схемы является использование в качестве накачки мощного субпикосекундного широкополосного импульса в диапазоне частот 0.3–3 ТГц (центральная длина волны $\lambda_1 = 200$ мкм). В качестве зондирующего использовался импульс второй гармоники с длиной волны 620 нм (энергия кванта 2 эВ).

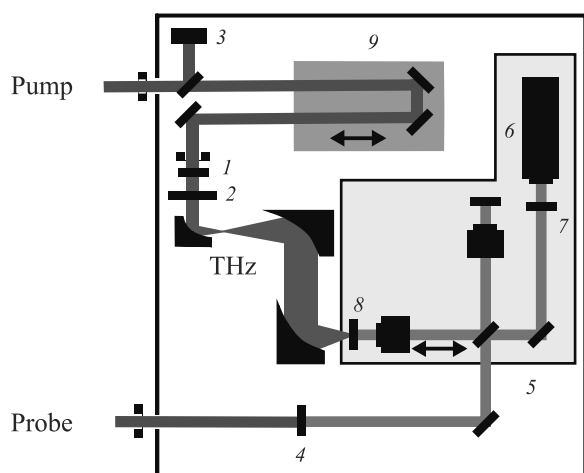


Рис. 1. (Цветной онлайн) Оптическая схема измерений: 1 – нелинейный кристалл DSTMS; 2 – терагерцовый фильтр; 3 – фотодиод; 4 – кристалл KDP; 5 – интерферометр Майкельсона; 6 – ПЗС камера; 7 – интерференционный фильтр; 8 – образец; 9 – оптическая линия задержки

Для уменьшения расходимости пучок ТГц излучения расширялся до диаметра ~ 40 мм (по уровню $1/e^2$) с помощью телескопа 6:1, состоящего из двух внеосевых параболических зеркал с эффективным фокусным расстоянием 25.4 и 152.4 мм. Фокусировка ТГц пучка осуществлялась внеосевым параболическим зеркалом диаметром 50.8 мм и с эффективным фокусным расстоянием 50.8 мм. Для измерения энергии импульсов ТГц излучения использовался калиброванный оптоакустический детектор (ячейка Голея, GC-1D, Tydex). Длительность импульса ТГц излучения составляла 0.7 пс по уровню 0.5 от максимума интенсивности и оценивалась по временной форме ТГц

импульса, измеренной методом электрооптического детектирования [14].

Энергия импульсов ТГц излучения достигала 30 ± 3 мкДж. В фокальной плоскости радиус пятна по уровню $1/e$ от максимума интенсивности, измеряемый “ножевым” методом, составлял величину 90 ± 5 мкм. Такие параметры позволяют получить максимальную напряженность поля в центре пятна фокусировки, равной 11 ± 1 МВ/см. Изменение энергии импульса ТГц излучения осуществлялось варьированием энергии лазерной накачки кристалла DSTMS с помощью поляризационного ослабителя, состоящего из призмы Глана и полуволновой пластины. Эксперименты проводились с пленками никеля толщиной 25 нм, напыленными магнетронным методом на стеклянную подложку толщиной 150 мкм.

В используемой методике накачка-зондирование воздействие на металлическую пленку импульсом ТГц излучения осуществлялось в конфигурации со встречным зондированием образца оптическим импульсом $\lambda_2 = 620$ нм через стеклянную подложку. Время между приходом на мишень нагревающего и зондирующего импульсов варьировалось с помощью оптической линии задержки 9. Импульс ТГц излучения равномерно прогревал пленку, поскольку длина поглощения излучения $\delta = \lambda_1/4\pi k$ в никеле в этом спектральном диапазоне примерно на порядок превышает ее толщину [39]. В то же время длина поглощения зондирующего излучения λ_2 (уменьшение интенсивности в e раз) была меньше толщины пленки и составила 12 нм [40].

Зондирующий импульс после оптической линии задержки направлялся в интерферометр Майкельсона, в котором исследуемый образец служил в качестве одного из зеркал. Изображение поверхности образца с помощью микрообъектива с числовой апертурой $NA = 0.3$ переносилось на матрицу ПЗС камеры. Для предотвращения попадания на ПЗС камеру излучения с длинами волн, отличными от зондирующего, на входе камеры устанавливался узкополосный интерференционный фильтр на длину волны 620 нм. Регистрируемая камерой интерферограмма является результатом интерференции объектной и опорной волны.

При измерениях записывались три интерферограммы: *начальная* (невозмущенной поверхности до воздействия), *временная* (во время воздействия) и *финальная* (спустя несколько секунд после воздействия). После каждого воздействия мишень сдвигалась на новое место микроманипулятором. Обработка интерферограмм проводилась методом Фурье-анализа с процедурой нормировки изобра-

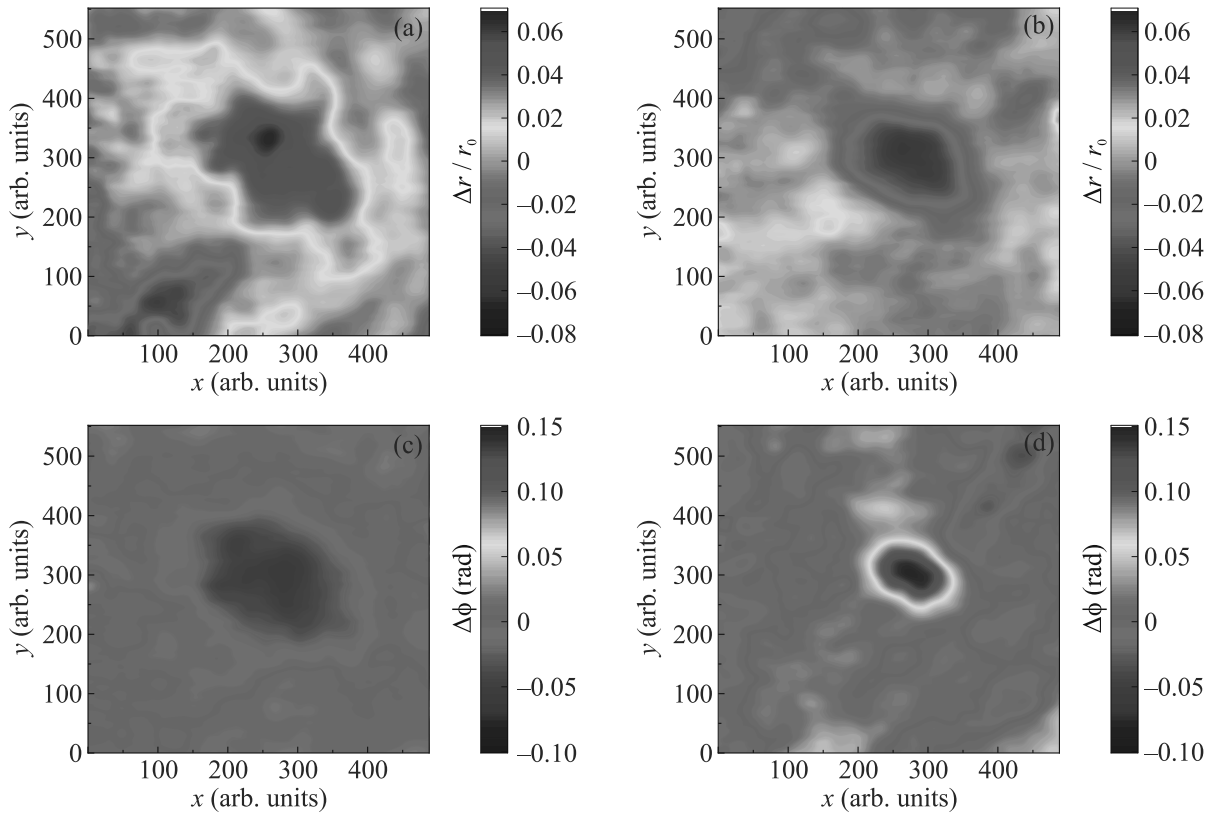


Рис. 2. (Цветной онлайн) Пространственные распределения изменения амплитуды (a), (b) и фазы (c), (d) зондирующего импульса для различных моментов времени: (a) – 0 пс; (b) и (c) – 6.7 пс; (d) – ∞ . Напряженность поля ТГц импульса – 11 МВ/см. Шкалы вертикальных и горизонтальных осей соответствуют пикселям ПЗС камеры

жений [41, 42]. Результатом обработки являлись пространственные распределения нормированного модуля $\Delta r(x, y)/r_0(x, y)$ и сдвига фазы $\Delta \varphi(x, y)$ комплексного коэффициента отражения зондирующего импульса, индуцированные воздействием импульса накачки. Здесь $\Delta r(x, y) = r(x, y) - r_0(x, y)$ и $\Delta \varphi(x, y) = \varphi(x, y) - \varphi_0(x, y)$, где $r_0(x, y)$ и $\varphi_0(x, y)$ получены при обработке *начальной* интерферограммы, $r(x, y)$ и $\varphi(x, y)$ получены при обработке *временной (или финальной)* интерферограмм. Коэффициенты отражения по полю (r_0) и интенсивности (R_0) связаны соотношением $r_0^2 = R_0$. Многократное повторение опытов с варьируемой задержкой зондирующего импульса относительно нагревающего обеспечивало построение временной динамики изменения нормированного модуля $\Delta r(t)/r_0$ и фазы $\Delta \varphi(t)$ комплексного коэффициента отражения. Погрешность измерения модуля и фазы при этом не превышала ± 0.02 и $\pm \pi/100$ рад соответственно. Временное разрешение, определяемое длительностью зондирующего импульса, составляло 100 фс. Пространственное разрешение в плоскости мишени определялось параметрами интерферометра и было

равно 2 мкм. Исследования морфологии поверхности проводились с помощью электронного сканирующего микроскопа (Tescan, Mira 3) и атомно-силового микроскопа (Veeco, Multimode V).

Результаты и их анализ. На рисунке 2 приведены пространственные распределения изменения амплитуды (a) и (b) и фазы (c) и (d) зондирующего импульса, полученные после обработки интерферограмм для различных моментов времени.

Здесь важно отметить, что изменение модуля коэффициента отражения в момент воздействия импульса накачки при $t = 0$ пс (рис. 2a) и в процессе релаксации электронов и решетки при $t = 6.7$ пс (рис. 2b) имеет разный знак.

На рисунке 3a, b приведены результаты измерений временной динамики сдвига фазы и изменения модуля комплексного коэффициента отражения зондирующего импульса по отношению ко времени прихода на образец ультракороткого ТГц импульса с напряженностью поля 11 МВ/см.

Данные получены после обработки интерферограмм при варьируемой временной задержке t между нагревающим и зондирующим импульсами в ин-

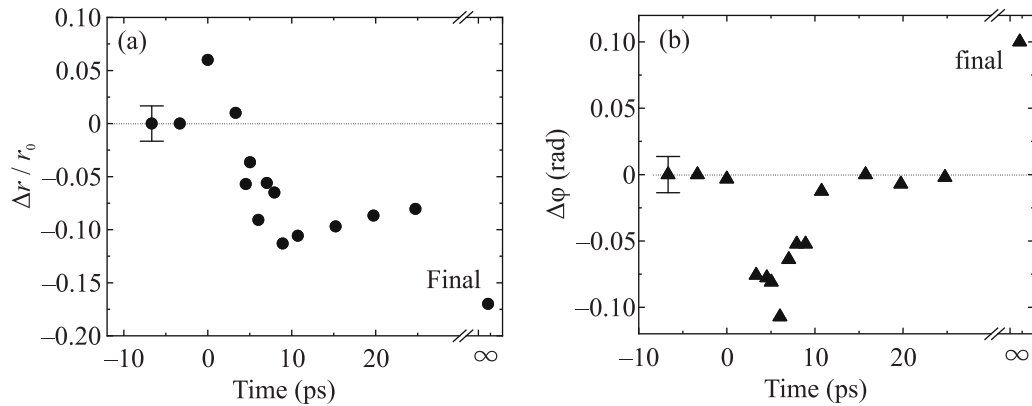


Рис. 3. Изменение амплитуды (а) и фазы (б) отраженной зондирующей волны от времени после воздействия импульса ТГц излучения с напряженностью поля 11 МВ/см

тервале от -7 пс до $+25$ пс. На графиках отложены значения $\Delta r/r_0$ и $\Delta\varphi$, измеренные в центральной части области взаимодействия с максимальной напряженностью ТГц поля, а нулевой момент времени $t = 0$ соответствует началу изменений оптических свойств. Также на графиках отображены значения измеряемых величин на бесконечности, которые соответствуют величине остаточных изменений (точки final).

Временная динамика изменения комплексного коэффициента отражения $\tilde{r} = r(t) \exp(i\varphi(t))$ играет важную роль для понимания оптического и механического отклика среды на лазерное воздействие. Коэффициент отражения $\tilde{r}$ связан с температурой T_e и T_i через комплексную диэлектрическую проницаемость среды $\tilde{\epsilon}(\omega, \nu)$, которая для d -металлов может быть описана моделью Друде–Лоренца, учитывающая вклад межзонных переходов $\epsilon_b(\omega)$ [43]:

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu_{\text{eff}})} + \epsilon_b(\omega), \quad (1)$$

где ω – частота излучения лазера, $\omega_p^2 = n_e e^2 / m^*$ – плазменная частота электронов (n_e , m^* – концентрация и эффективная масса электронов проводимости). Эффективная частота электрон-электронных и электрон-ионных столкновений описывается известным соотношением [10, 34]:

$$\nu_{\text{eff}} = AT_e^2 + BT_i, \quad (2)$$

Диэлектрическая проницаемость среды зависит от механизма поглощения, который может включать как межзонные, так и внутризонные переходы. Близость энергии фотонов $\hbar\omega$ к энергии межзонного перехода ΔE будет определять величину и знак изменения термоиндуцированного коэффициента отражения [37].

Ранее в ТТР экспериментах по измерению временной динамики отражения никеля в ближнем ИК диапазоне спектра [37, 44] было показано, что увеличение коэффициента отражения зондирующего импульса ($\Delta r > 0$) согласно выражению (2) в момент воздействия УКИ вызвано ростом частоты электрон-электронных столкновений в условиях неравновесного нагрева электронной подсистемы при $T_e \gg T_i$. Последующее уменьшение коэффициента отражения ниже невозмущенного значения ($\Delta r < 0$) спустя примерно 5 пс вызвано нагревом решетки на стадии выравнивания температур T_e и T_i , сопровождающееся расширением образца и уменьшением плазменной частоты ω_p в формуле (1).

Из рисунка 3а следует, что в момент воздействия ТГц импульса также наблюдается кратковременное увеличение модуля коэффициента отражения оптического диагностического импульса $\Delta r/r_0$ примерно на 6%, после чего за 5–7 пс происходит его уменьшение на 10–15% относительно невозмущенного значения.

Естественно полагать, что аналогичное поведение коэффициента отражения оптического зондирующего импульса в наших экспериментах при воздействии ТГц импульса накачки, так же как и при воздействии УКИ оптического диапазона [37], в обоих случаях обусловлено неравновесным нагревом электронной и ионной подсистем никеля и возникновением 2Т состояния с $T_e > T_i$ в течение нескольких пикосекунд.

Для ТГц излучения (центральная длина волны – 200 мкм, а частота – 1.5 ТГц) металлическую нанопленку на диэлектрической подложке следует рассматривать как субволновую структуру, учитывая также нагрев подложки. Непосредственное измерение пропускания не представлялось возможным из-за низкого уровня сигнала в связи с большими по-

терями на отражение и поглощение излучения пленочным образцом. В то же время было измерено пропускание только стеклянной подложки, составившее 15 %. Коэффициент поглощения ТГц импульса в стекле при этом составил 120 см^{-1} , а коэффициент экстинкции $k \approx 0.19$.

Оценим соотношение объемной поглощенной энергии ТГц излучения в нанопленке никеля и в стеклянной подложке по данным оптических констант. На рисунке 4 приведены зависимости (сплошные линии) для коэффициентов отражения R , пропускания T и поглощения A пленки Ni толщиной 25 нм, рассчитанные для структуры воздух/никель/стекло матричным методом (Transfer Matrix Method [45]). В данном случае для центральной длины волны ТГц импульса $\lambda_i = 200 \text{ мкм}$ использовались значения оптических констант (воздух $n_0 = 1$, $k_0 = 0$; никель $n_1 = 10$, $k_1 = 40$ [39]; стекло $n_2 = 2.25$ [46], $k_2 = 0.19$).

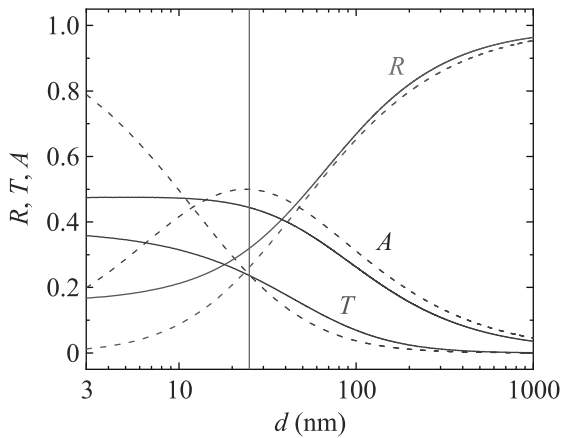


Рис. 4. (Цветной онлайн) Коэффициенты отражения R , пропускания T и поглощения A пленки никеля в зависимости от ее толщины, рассчитанные матричным методом [45] (сплошные линии) и по данным проводимости [19] (пунктир)

Соответствующие значения составили: отражение $R = 0.3$, пропускание $T = 0.24$ и поглощение $A = 0.46$. Отметим, что расчет пропускания пленки Ni хорошо согласуется с результатами измерений поглощения и пропускания металлических нанопленок [21].

В ТГц диапазоне в области нормального скин-эффекта $\delta = c/\sqrt{2\pi\sigma\omega}$ значения коэффициентов R , T и A для металлических нанопленок при нормальном падении могут быть получены из соотношений [19]:

$$R = \beta^2/(1+\beta)^2; \quad T = 1/(1+\beta)^2; \quad A = 1 - R - T. \quad (3)$$

Здесь параметр $\beta = 2\pi\sigma d/c$, где c – скорость света. Как видно из формул (3), в случае нормального скин-эффекта параметр β не зависит от частоты излучения ω , но зависит от толщины пленки d и ее проводимости σ .

На рисунке 4 приведены аналогичные зависимости (пунктир), рассчитанные по формулам (3). Наилучшее совпадение зависимостей имеет место для толщин более 20 нм при значении проводимости $\sigma = 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ (система Гаусса). Эта величина примерно на два порядка ниже проводимости массива никеля, равной $\sigma = 1.46 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$ (или $1.63 \cdot 10^7 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ в системе СИ [47]). Из рисунка 4 и формул (3) следует, что пленка Ni имеет максимум поглощения при критической толщине примерно 20–30 нм (значении параметра $\beta = 1$).

Известно, что рост проводимости пленки σ при фиксированной ее толщине ведет к уменьшению пропускания пленочного образца (формула Тинхама [22, 48]). При этом анализ выражений (3) показывает, что с увеличением σ растет отношение поглощение/пропускание пленки, т.е. подложка греется существенно меньше, по сравнению с металлической пленкой. Аналогичные оценки по данным проводимости массива никеля ($\sigma = 1.46 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$ [47]) и полученные матричным методом для значений оптических констант массива ($n = 219$, $k = 317$ [49]) дают величину поглощения и пропускания соответственно $A \approx 0.03$ и $T \approx 2 \cdot 10^{-4}$. При этом коэффициент отражения возрастает до $R \approx 0.97$.

Длина поглощения ТГц излучения в стекле в зависимости от частоты в диапазоне от 0.5 до 10 ТГц может варьироваться от 500 до 10 мкм по данным работ [46, 50]. Для спектра нашего импульса измеренная длина поглощения в стекле составила примерно 80 мкм. Это значение более чем на 3 порядка по величине превышает толщину пленки никеля. Таким образом, можно утверждать, что объемная поглощенная плотность энергии ТГц излучения в стекле и соответственно его нагрев будут крайне малы по сравнению с нагревом металлической пленки.

Рассмотрим поведение фазы зондирующего импульса на рис. 3б. Сдвиг фазы может быть вызван как изменением оптических констант вещества при возбуждении, так и движением поверхности мишени [41, 42]. На рисунке 3б видно, что регистрируемый сдвиг фазы зондирующего импульса $\Delta\varphi$ с течением времени меняет знак. Положительный сдвиг фазы зондирующей волны при $t = \infty$ (точка final) соответствует увеличению расстояния от объектива интерферометра до поверхности пленки и, очевидно, обусловлен наличием остаточных изменений в геометрии

рии образца после воздействия. Как будет показано ниже, эти изменения, вероятно, связаны с модификацией пленки в результате нагрева и ее отслоением от подложки на больших временах.

Время электрон-фононной релаксации в никеле $\tau_{el} \approx 1$ пс [51] меньше характерного акустического масштаба $t^* = d/c_0 \approx 4 \div 5$ пс, где $c_0 = 6$ км/с – продольная скорость звука. Поэтому быстрый квази-изохорический нагрев ТГц импульсом приводит к созданию давления в пленке. Последующая релаксация напряжений приводит к расширению пленки и генерации пикосекундного акустического импульса длительностью порядка t^* [44, 51], распространяющегося далее в подложку. Даже в случае максимального нагрева никеля до температуры плавления 1726 К, величина теплового расширения пленки Δd не должна превысить 1 нм (коэффициент линейного расширения никеля $2 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$ [47]). Сдвиг фазы зондирующего импульса при смещении границы никель/стекло на 1 нм, равен $\Delta\varphi = 4\pi n\Delta d/\lambda_2 = 0.03$ рад. Это в несколько раз меньше регистрируемого в эксперименте отрицательного значения $\Delta\varphi$ (рис. 3b). Кроме того, из-за различия акустических импедансов сред (воздух и стекло), граничащих с металлической пленкой, ее расширение будет происходить преимущественно в направлении свободной поверхности. Поэтому влияние смещения контакта металл/подложка на изменение фазы зондирующего импульса можно считать пренебрежимо малым. Это также подтверждается отсутствием выраженных пикосекундных осцилляций на регистрируемой зависимости $\Delta\varphi(t)$, связанных с возможными реверберациями пленки после импульсного воздействия [52]. Таким образом, можно полагать, что наблюдаемый отрицательный сдвиг фазы в течение первых нескольких пикосекунд (рис. 3b) вызван в основном изменением оптических констант никеля в результате нагрева.

Для анализа процесса нагрева пленки нами было исследовано поведение комплексной диэлектрической проницаемости на длине волны зондирующего излучения $\lambda_2 = 620$ нм. Методы эллипсометрии и интерферометрии с временным разрешением при выполнении определенных условий могут применяться для изучения пикосекундной динамики диэлектрической проницаемости среды [41, 53, 54].

Из рисунка 3 и приведенных выше оценок следует, что наблюдаемое в течение первых 10 пс после воздействия изменение амплитуды и фазы в основном обусловлено изменением оптических констант, которое вызвано нагревом электронной и ионной подсистем никеля. Кроме того, выход фазы зондиру-

ющего импульса на начальное значение ($\Delta\varphi(t) \approx 0$) свидетельствует о пренебрежимо малом движении отражающей поверхности во временном интервале от 0 до 30 пс. Толщина скин-слоя зондирующего импульса, равная 12 нм на длине волны 620 нм [40], меньше толщины пленки. Импульс ТГц излучения однородно прогревает пленку никеля толщиной 25 нм (скин-слой $\delta = c/\sqrt{2\pi\sigma\omega} \approx 400$ нм). Эти факторы, а именно отсутствие движения и однородный прогрев зондируемого слоя позволяют на основании измерений комплексного коэффициента отражения зондирующего импульса и формул Френеля получить информацию о динамике комплексной диэлектрической проницаемости никеля на длине волны 620 нм после воздействия мощного импульса ТГц излучения.

В случае нормального падения излучения комплексный коэффициент отражения мишени связан с комплексным показателем преломления среды $\tilde{n} = n - ik$ посредством соотношения [41, 53]:

$$\tilde{r} = re^{i\varphi} = \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2}, \quad (4)$$

где $\tilde{n}_1 = n_1 - ik_1$ – комплексный показатель преломления среды 1 (стекла), а $\tilde{n}_2 = n_2 - ik_2$ – комплексный показатель преломления среды 2 (металлической пленки). Подставляя $\tilde{n}_1 = n_1 - ik_1$ и $\tilde{n}_2 = n_2 - ik_2$ в выражение (4), после преобразований получаем следующие формулы для расчета модуля r и фазы φ комплексного коэффициента отражения:

$$r = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \Bigg)^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

$$\varphi = \pi + \arctg \frac{2(n_1 k_2 - n_2 k_1)}{n_1^2 - n_2^2 + k_1^2 - k_2^2}. \quad (6)$$

Численно решая нелинейную систему уравнений (5), (6) относительно n_2 и k_2 для каждой пары значений амплитуды r и фазы φ , получаем искомые данные об оптических константах исследуемого вещества. Здесь на длине волны зондирующего излучения 620 нм действительная и мнимая части комплексного показателя преломления стекла взята равной $n_1 = 1.5$ и $k_1 = 0$, а значения оптических констант невозмущенного никеля – $n_{20} = 1.99$ и $k_{20} = 4.04$ [40].

Действительная и мнимая части показателя преломления связаны с комплексной диэлектрической проницаемостью среды посредством соотношений:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2; \quad \varepsilon_2 = 2nk. \quad (7)$$

На рисунке 5 представлена временная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости

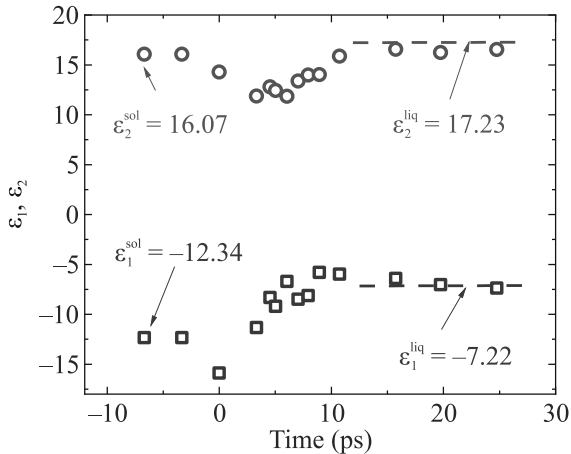


Рис. 5. (Цветной онлайн) Изменение действительной ϵ_1 (синие квадраты) и мнимой ϵ_2 (красные кружки) части диэлектрической проницаемости от времени на длине волны 620 нм. Пунктиром показаны значения комплексной диэлектрической проницаемости расплава никеля из работы [55]. Напряженность поля ТГц импульса 11 МВ/см

пленки никеля, рассчитанная по формулам (5)–(7), в приближении отсутствия смещения поверхности во временном интервале от 0 до 30 пс.

Действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости в момент воздействия увеличивается по абсолютной величине, после чего, примерно спустя 5–10 пс, приближается к значению диэлектрической проницаемости расплава Ni, равному $\epsilon_1^{\text{liq}} = -7.22$ на длине волны 620 нм по данным работы [55]. При этом мнимая часть диэлектрической проницаемости ϵ_2 , ответственная за поглощение излучения, после воздействия уменьшается относительно первоначального значения. Это свидетельствует о кратковременном индуцированном увеличении пропускания (просветлении) пленки Ni в оптическом диапазоне на временах 10^{-12} – 10^{-11} с. Такое поведение комплексной диэлектрической проницаемости на длине волны 620 нм свидетельствует о сильном возбуждении электронов *s*- и *d*-зон никеля в первые пикосекунды после воздействия импульса ТГц излучения с последующим нагревом решетки и началом ее плавления на временах $\geq 10^{-11}$ с.

Согласно данным моделирования из работ [44, 56] при нагреве УКИ вблизи порога плавления Ni температура электронной подсистемы T_e может достигать 3–6 К.

На рисунке 6 приведены результаты исследований поверхности образца никеля толщиной 25 нм до и после воздействия ТГц излучения с помощью СЭМ.

Результаты исследований на СЭМ не выявили нарушения сплошности и разрывов в пленке. В то же

время ее поверхность является сильно модифицированной в результате плавления, что согласуется с измерениями комплексной диэлектрической проницаемости. При этом плавление, по-видимому, носит локальный характер. Об этом свидетельствует образование на поверхности после затвердевания расплава каплевидных образований размером от 50 до 200 нм, а также заметное увеличение ее шероховатости. По данным АСМ измерений после воздействия величина шероховатости модифицированной поверхности R_a возросла с 1.1 до 25 нм. Известно, что для нанопленок имеет место так называемый эффект деветинга [38], состоящий в стремлении минимизировать поверхностную энергию при нагреве путем образования островков и капель.

Увеличение шероховатости поверхности, по-видимому, является причиной уменьшения коэффициента отражения модифицированной пленки (точка final на рис. 3а). Кроме того, по данным измерений фазы (точка final на рис. 3б) имеет место деламинация пленки. Причиной этого может являться возникновение растягивающих напряжений на контакте металл/стекло из-за различия акустических импедансов этих сред [52], а также ухудшение адгезии модифицированной пленки. При этом максимальная величина сдвига фазы в центре области взаимодействия достигает $\Delta\varphi = 0.15$ рад, который соответствует величине смещения отражающей поверхности на величину $\Delta z = \Delta\varphi n_1 \lambda / 4\pi \approx 11$ нм, соизмеримой с величиной шероховатости. Это может быть связано с отслоением пленки, или модификацией морфологии контакта пленка/стекло.

Закключение. В настоящей работе методом фемтосекундной интерференционной микроскопии с временным ($\sim 10^{-13}$ с) разрешением исследована пикосекундная динамика изменения комплексного коэффициента отражения и диэлектрической проницаемости на длине волны 620 нм для пленки никеля толщиной 25 нм на стеклянной подложке, нагреваемой субпикосекундным импульсом ТГц излучения с напряженностью поля 11 МВ/см. Результаты измерений показали увеличение коэффициента отражения в видимой области в момент воздействия, связанное с сильным возбуждением электронной подсистемы никеля импульсом ТГц излучения. Новым результатом является экспериментально наблюдаемое двухтемпературное состояния металла с $T_e > T_i$ в условиях нагрева субпикосекундным импульсом излучения ТГц диапазона спектра. Поведение комплексной диэлектрической проницаемости свидетельствует о начале плавления пленки спустя 5–10 пс после воздействия. При этом максимальная температура

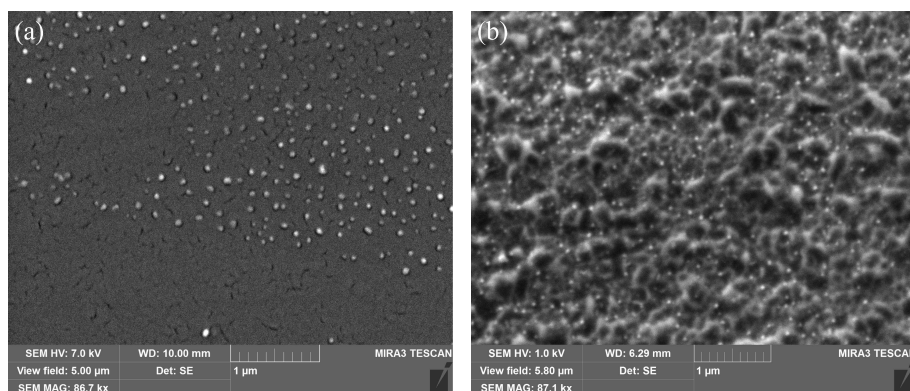


Рис. 6. Изображения (СЭМ) фрагмента пленки никеля (а) – до воздействия; (б) – после однократного воздействия ТГц импульса с напряженностью поля 11 МВ/см

электронной подсистемы никеля вблизи порога плавления может достигать нескольких тысяч градусов. Результаты исследований морфологии модифицированной поверхности пленки на СЭМ и АСМ, а также интерферометрических измерений, указывают на частичное локальное плавление пленки с образованием застывших каплевидных наноразмерных образований на поверхности, а также о возможном нарушении контакта с подложкой в области воздействия. При этом макроскопических разрушений пленки при однократном воздействии в рассматриваемых условиях не наблюдалось.

Полученные в настоящей работе результаты могут быть использованы для изучения механизма воздействия мощных сверхкоротких импульсов ТГц излучения на металлические нанопленки, применяемые в качестве силовых элементов оптики ТГц диапазона и материалов спинтроники.

Авторы статьи признательны А. А. Фролову за полезные замечания.

Финансирование работы. Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение с Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук #075-00270-24-00) на оборудовании Центра коллективного пользования “Лазерный фемтосекундный комплекс” и уникальной научной установке “Лазерный тераваттный фемтосекундный комплекс” Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

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

1. C. Vicario, M. Jazbinsek, A.V. Ovchinnikov,

- O.V. Chefonov, S.I. Ashitkov, M.B. Agranat, and C.P. Hauri, *Opt. Express* **23**, 4573 (2015).
2. M. Shalaby and C.P. Hauri, *Nat. Commun.* **6**, 5976 (2015).
3. C. Vicario, A. Ovchinnikov, S. Ashitkov, M. Agranat, V. Fortov, and C. Hauri, *Opt. Lett.* **39**, 6632 (2014).
4. Б.В. Румянцев, А.В. Пушкин, Д.З. Сулейманова, Н.А. Жидовцев, Ф.В. Потемкин, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 571 (2023).
5. А.В. Овчинников, О.В. Чефонов, М.Б. Агранат, К.А. Гришунин, Н.А. Ильин, Р.В. Писарев, А.В. Кимель, А.М. Калашникова, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 467 (2016).
6. O. Chefonov, A. Ovchinnikov, S. Romashevskiy, X. Chai, T. Ozaki, A. Savel'ev, M. Agranat, and V. Fortov, *Opt. Lett.* **42**, 4889 (2017).
7. X. Chai, X. Ropagnol, A. Ovchinnikov, O. Chefonov, A. Ushakov, C.M. Garcia-Rosas, E. Isgandarov, M. Agranat, T. Ozaki, and A. Savel'ev, *Opt. Lett.* **43**, 5463 (2018).
8. M. Shalaby, C. Vicario, and C.P. Hauri, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 182903 (2016).
9. В.В. Герасимов, Б.А. Князев, П.Д. Рудыч, В.С. Черкасский, *Приборы и техника эксперимента* **50**, 103 (2007).
10. S.G. Bezhanov and S.A. Uryupin, *Opt. Lett.* **43**, 3069 (2018).
11. С.В. Сазонов, Н.В. Устинов, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 30 (2020).
12. O.V. Chefonov, A.V. Ovchinnikov, M.B. Agranat, V.E. Fortov, E.S. Efimenko, A.N. Stepanov, and A.B. Savel'ev, *Phys. Rev. B* **98**, 165206 (2018).
13. О.В. Чефонов, А.В. Овчинников, С.А. Евлашин, М.Б. Агранат, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 41 (2019).
14. O.V. Chefonov, A.V. Ovchinnikov, S.A. Evlashin, and M.B. Agranat, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **39**, 1047 (2018).

15. M. B. Agranat, O. V. Chefonov, A. V. Ovchinnikov, S. I. Ashitkov, V. E. Fortov, and P. S. Kondratenko, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 085704 (2018).
16. O. V. Chefonov, A. V. Ovchinnikov, D. S. Sitnikov, and M. B. Agranat, *High Temperature* **57**, 137 (2019).
17. V. S. Makin and R. S. Makin, *J. Optical Technology* **87**, 3 (2020).
18. Г. В. Розенберг, *Оптика тонкослойных покрытий*, Физматгиз, М. (1958), 570 с.
19. S. Fahy, C. Kittel, and S. G. Louie, *Am. J. Phys.* **56**(11), 989 (1988).
20. A. Hadni and X. Gerbaux, *Infrared Phys.* **30**(6), 465 (1990).
21. D. Zhou, E. P. J. Parrott, D. J. Paul, and J. A. Zeitler, *J. Appl. Phys.* **104**(5), 053110 (2008).
22. K. Neeraj, A. Sharma, M. Almeida, P. Matthes, F. Samad, G. Salvan, O. Hellwig, and S. Bonetti, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 102406 (2022).
23. N. Acharyya, V. Sajeev, S. Rane, S. Karmakar, and D. R. Chowdhury, *J. Appl. Phys.* **134**, 033102 (2023).
24. V. L. Ginzburg and V. P. Shabanskii, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **100**, 445 (1955).
25. М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, Л. В. Танатаров, *ЖЭТФ* **31**, 232 (1956).
26. E. S. Borovik, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **91**, 771 (1953).
27. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, *ЖЭТФ* **66**, 776 (1974).
28. А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Ф. Ф. Самохин, *УФН* **187**, 159 (2017).
29. И. А. Артюков, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, С. В. Макаров, П. Н. Салтуганов, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 54 (2014).
30. С. А. Ромашевский, В. А. Хохлов, С. И. Ашитков, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, П. С. Комаров, А. Н. Паршиков, Ю. В. Петров, Е. В. Струлева, П. А. Цыганков, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 311 (2021).
31. A. J. Schmidt, *Annu. Rev. Heat Transfer* **16**, 159 (2013).
32. J. Hohlfeld, S.-S. Wellershoff, J. Güdde, U. Conrad, V. Jähnke, and E. Matthias, *Chem. Phys.* **251**, 237 (2000).
33. C. Guo, G. Rodriguez, A. Lobad, and A. J. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4493 (2000).
34. P. M. Norris, A. P. Caffrey, R. J. Stevens, J. M. Klopff, J. T. McLeskey Jr., and A. N. Smith, *Rev. Sci. Instrum.* **74**, 400 (2003).
35. E. Radue, J. A. Tomko, A. Giri, J. L. Braun, X. Zhou, O. V. Prezhdo, E. L. Runnerstrom, J. P. Maria, and P. E. Hopkins, *ACS Photonics* **5**, 4880 (2018).
36. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, С. А. Ромашевский, Ю. В. Петров, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 107 (2023).
37. P. E. Hopkins, J. M. Klopff, and P. M. Norris, *Appl. Optics* **46**, 2076 (2007).
38. C. V. Thompson, *Annu. Rev. Mater. Res.* **42**, 399 (2012).
39. F.-Y. Ma, J.-P. Su, Q.-X. Gong, J. Yang, Y.-L. Du, M.-T. Guo, and B. Yuan, *Chin. Phys. Lett.* **28**, 097803 (2011).
40. P. B. Johnson and R. W. Christy, *Phys. Rev. B* **9**, 5056 (1974).
41. V. V. Temnov, K. Sokolovski-Tinten, P. Zhou, and D. von der Linde, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1954 (2006).
42. М. Б. Агранат, Н. Е. Андреев, С. И. Ашитков, М. Е. Вейсман, П. Р. Левашов, А. В. Овчинников, Д. С. Ситников, В. Е. Фортов, К. В. Хищенко, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 328 (2007).
43. E. Silaeva, L. Saddier, and J.-P. Colombier, *Appl. Sci.* **11**, 9902 (2021).
44. В. А. Хохлов, С. А. Ромашевский, С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, *Письма в ЖЭТФ* **120**, 550 (2024).
45. J. Bonse, K.-W. Brzezinka, and A. J. Meixner, *Appl. Surf. Sci.* **221**, 215 (2004).
46. N. J. Tostanoski and S. K. Sundaram, *Sci. Rep.* **13**(1), 1 (2003).
47. И. К. Кикоин, *Таблица физических величин*, Спр., Атомиздат, М. (1976), 177 с.
48. N. Laman and D. Grischkowsky, *Appl. Phys. Lett.* **93**(5), 051105 (2008).
49. M. A. Ordal, R. J. Bell, R. W. Alexander, Jr., L. L. Long, and M. R. Querry, *Appl. Optics* **26**(4), 744 (1987).
50. Н. А. Винокуров, Б. А. Князев, Г. Н. Кулипанов, А. Н. Матвеев, В. М. Попик, В. С. Черкасский, М. А. Щеглов, *ЖТФ* **77**(7), 91 (2007).
51. T. Saito, O. Matsuda, and O. Wright, *Phys. Rev. B* **67**, 205421 (2003).
52. V. A. Khokhlov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. V. Shepelev, and D. K. Il'nitsky, *J. Phys.: Conf. Ser.* **653**, 012003 (2015).
53. С. И. Ашитков, П. С. Комаров, Е. В. Струлева, А. А. Юркевич, М. Б. Агранат, *ТБТ* **54**, 957 (2016).
54. J. Winter, S. Rapp, M. Schmidt, and H. P. Huber, *Appl. Surf. Sci.* **417**, 2 (2017).
55. S. Krishnan, K. J. Yagawa, and P. C. Nordine, *Phys. Rev. B* **55**, 8201 (1997).
56. D. S. Ivanov and L. V. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **68**, 064114 (2003).

Особенности резонансного комбинационного рассеяния света в ультратвердом аморфном углероде

М. Ю. Попов⁺¹⁾, Ф. С. Хоробрых^{*×}, С. А. Климин[°], Д. А. Овсянников[▽]

⁺ Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

^{*} Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, 117342 Москва, Россия

[×] Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

[°] Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

[▽] Федеральное государственное бюджетное научное учреждение

“Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов”

Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 сентября 2024 г.

После переработки 17 сентября 2024 г.

Принята к публикации 17 сентября 2024 г.

В работе исследованы резонансные явления комбинационного рассеяния света в углеродных нанокластерах, образованных sp^3 связями. Мы синтезировали такие структуры из фуллерита C_{60} под давлением 20–25 ГПа при комнатной температуре (1) и при нагреве до 1400 К (2). Наблюдается два типа резонанса комбинационного рассеяния света. Первый тип связан с резонансным усилением спектров комбинационного рассеяния света вблизи края поглощения и для полученных образцов наблюдался при возбуждении лазерным излучением на длинах волн 1064 нм (1) и 532 нм (2). В таких спектрах проявляются высокочастотные моды sp^3 всех нанокластеров от 1388 до 1640 $см^{-1}$. Второй тип резонанса проявляется в активации одной из мод в диапазоне 1388–1640 $см^{-1}$ спектра комбинационного рассеяния света в зависимости от длины волны возбуждающего излучения. Частота активной моды линейно зависит от длины волны возбуждающего излучения. Методом пьезоспектроскопии показано, что при более коротковолновом возбуждении в процессах комбинационного рассеяния света участвуют кластеры с большим модулем объемного сжатия.

DOI: 10.31857/S0370274X24100199, EDN: FYIOEM

Введение. В условиях высоких давлений и температур фуллерит трансформируется в ультратвердые аморфные структуры на основе кластеров, образованных sp^3 связями [1–5]. Графит, стеклоуглерод, онионы, нанотрубки и т.д. при комнатной температуре также преобразуются в аморфные структуры с sp^3 связями при давлении ~ 15 –50 ГПа [6–8], однако, в отличие от фуллерита, после снятия давления они частично или полностью переходят в аморфные структуры, образованные в основном sp^2 связями.

Характерной особенностью спектров комбинационного рассеяния света (КРС) аморфных sp^3 связанных углеродных нанокластеров является наличие так называемой “дисперсной” линии около 1550 $см^{-1}$. Ее положение (1485–1640 $см^{-1}$) линейно зависит от длины волны возбуждающего излучения (соответственно 785–257 нм). Полуширина составляет около 250 $см^{-1}$ [1]. На основе экспериментальных исследо-

ваний и моделирования показано, что объемные модули упругости таких кластеров варьируются от 560 до 730 ГПа. Это обусловлено конфигурацией кластеров, образованных атомами углерода с 3 и 4 ковалентными sp^3 связями [1, 9]. В данном случае под sp^3 связью подразумевается отсутствие π электронов, несмотря на наличие атомов углерода, связанных только с тремя соседями.

Природа наблюдаемой “дисперсной” зависимости линии около 1550 $см^{-1}$ sp^3 углеродных нанокластеров до конца не ясна и не может быть объяснена известными случаями резонансов КРС при возбуждении фотонами с энергиями, близкими к критическим точкам межзонных переходов [10]. В частности, это может быть энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Подобный резонанс при длине волны возбуждающего излучения 1064 нм наблюдался для образца, полученного из фуллерита под давлением 25 ГПа с приложением сдвиговых деформаций под нагрузкой (образец про-

¹⁾ e-mail: mikhail.yu.popov@mail.ru

зрачен в ближней инфракрасной (ИК) области). В этом случае все возможные положения “дисперсной” линии присутствуют в спектре [1]. Нагрев образца фуллерита при давлении 20–27 ГПа до температур 1200–1300 К приводит к формированию углеродного материала, образованного sp^3 связями, с энергетической щелью 1.85–2.79 эВ [2]. Следовательно, варьируя условия получения sp^3 кластерных структур из фуллерита, можно менять величину щели и, соответственно, длину волны, при которой можно наблюдать резонансные спектры. В настоящей работе мы сообщаем о реализации такого подхода к наблюдению особенностей резонансных спектров sp^3 углеродных нанокластеров. Это дало возможность зарегистрировать суммарный вклад в спектр КРС всех возможных положений “дисперсной” линии для разных образцов и показать, что “дисперсная” зависимость линии около 1550 см^{-1} обусловлена селективным возбуждением спектров КРС sp^3 углеродных нанокластеров в зависимости от значения силовых констант кластера.

Методика эксперимента. В условиях гидростатического нагружения образец C_{60} остается непрозрачным до давления 25 ГПа. Инициализация процесса фазового перехода при давлении 18 ГПа, приводящего к образованию ультратвердого состояния, делает образец прозрачным под давлением [1]. Инициализация может осуществляться либо за счет приложения сдвиговых деформаций, либо нагрева [1, 2]. Непрозрачность позволяет нагреть образец C_{60} при давлении 20–25 ГПа с помощью лазерного излучения напрямую, без абсорбера излучения. В работе мы использовали оба метода активации трансформации фуллерита под давлением 20–25 ГПа: (1) сдвиг под давлением с использованием сдвиговой камеры с алмазными наковальнями (СКАН) [11] и (2) лазерный нагрев [12] до температуры $1400 \pm 100\text{ К}$.

Схема эксперимента приведена на рис. 1. Слева представлена схема сдвига под давлением (1). Диаметр рабочих площадок наковален – 300 мкм, диаметр образца – 100 мкм. Образец нагружался в вольфрамовой каскетке в контакте с наковальнями. Давление в образце контролировалось методом пьезоспектроскопии [1, 11]. При достижении давления в образце 20–25 ГПа к образцу прикладывалась сдвиговая деформация за счет поворота одной из наковален на угол 35° вокруг ее оси симметрии [11]. Справа представлена схема нагружения образца в случае лазерного нагрева (2). Диаметр рабочих площадок наковален – 400 мкм. Образец помещался в отверстие в гasketке диаметром 130 мкм в окружении NaCl, который является тепло-

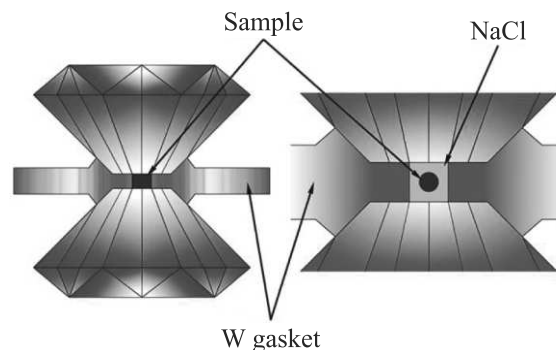


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента. Слева – сдвиг под давлением (1); справа – схема нагружения образца в случае лазерного нагрева (2) (детали в тексте)

изолирующим слоем между нагреваемым образцом и наковальной.

Спектры регистрировали с помощью микроскопа КРС Renishaw inVia (Renishaw plc, New Mills, Wotton-under-Edge, Gloucestershire, United Kingdom) и фурье-спектрометра КРС “RFS 100/s” (Bruker, Germany), возбуждение 1064 нм (Nd:YAG). В случае Renishaw inVia спектры возбуждались непрерывным лазерным излучением на длинах волн 532 и 405 нм. Регистрация осуществлялась по конфокальной схеме, использовался объектив Olympus LMPlan 50x, входная щель прибора составляла 20 мкм. Спектральное разрешение прибора 1 см^{-1} . Лазерное излучение фокусировалось в пятно на образце 1.5 мкм. Мощность излучения при регистрации спектров образцов под давлением в СКАН составляла 5 мВт, после извлечения образца – 1 мВт. Мощность излучения подбиралась таким образом, чтобы не было смещения линии КРС в низкочастотную область, обусловленного нагревом, или трансформации образца под воздействием лазерного излучения [13]. Подбор мощности начинался со значения 0.1 мВт. В любом случае максимальная плотность мощности, используемая для возбуждения спектров КРС, в ~ 100 раз ниже плотности, при которой в работе осуществлялся нагрев образца до 1400 К.

Время накопления одного цикла составляло от 5 до 10 мин, каждый спектр усреднялся по 3–5 циклам. Фон в приведенных в статье спектрах вычтен. Спектры с каждого образца снимались в 9 точках, равномерно распределенных по поверхности, в автоматическом режиме. На рисунках 2 и 3 приведены типичные спектры. Среднеквадратичное отклонение положения “дисперсной” линии по 9 точкам составляет 5 см^{-1} .

В случае RFS 100 мощность, исключаяющая перегрев, подбиралась таким же образом, как описано

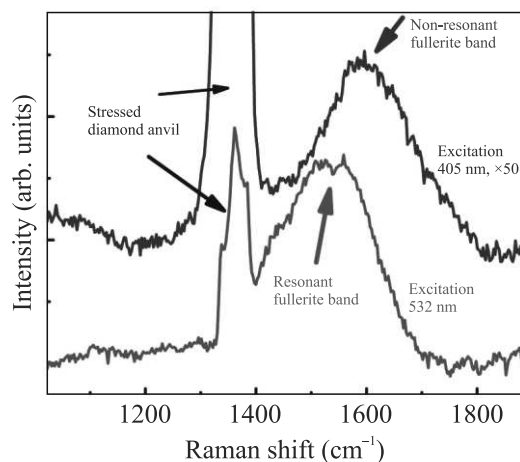


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры, снятые из одной и той же области образца фуллерита под давлением 24 ГПа после нагрева. Длины волн возбуждающего излучения 405 и 532 нм. Для удобства представления результатов интенсивность спектра, полученного при возбуждении на 405 нм, увеличена в 50 раз. Средне-квадратичное отклонение положений линий фуллерита 5 см^{-1}

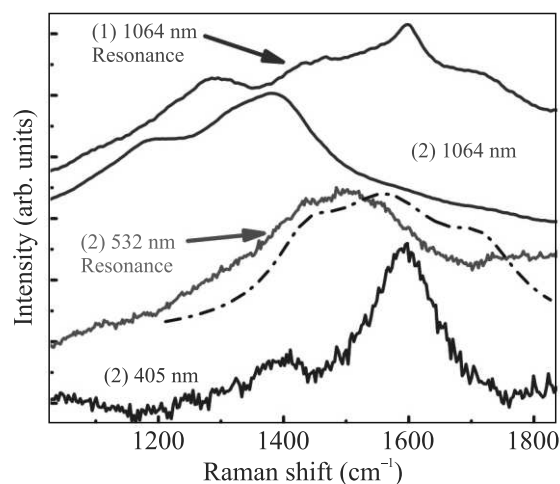


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры КРС образцов фуллерита (1) и (2). Длины волн возбуждающего излучения 405, 532 и 1064 нм. Огибающая всех возможных положений "дисперсной" линии [1] выделена пунктиром. Резонансные спектры помечены стрелками. Средне-квадратичное отклонение положений линий — 5 см^{-1}

выше. Мощность излучения на образце составляла 200 и 100 мВт для образцов (1) и (2) соответственно. За счет того, что лазерное излучение было сфокусировано в пятно 500 мкм, плотность мощности была ниже, чем при измерении на Renishaw. Время накопления спектров с разрешением 5 см^{-1} составляло 12 и 1 ч, соответственно. Разница во времени накопления обусловлена разной прозрачностью образцов.

Результаты экспериментов и обсуждение.

После нагрева интенсивность спектра КРС образца фуллерита увеличилась в 50 раз при возбуждении на длине волны 532 нм и существенно не изменилась при возбуждении на 405 нм. Оценка изменения интенсивности спектров произведена относительно интенсивности спектра КРС напряженной вершины алмазной наковальни, который, в частности, зависит от величины напряжений в наковальне и от конфокальности микроскопа [14]. Последние два параметра после нагрева не изменились.

На рисунке 2 приведены спектры, снятые из одной и той же области образца под давлением 24 ГПа после нагрева. Для удобства представления интенсивность спектра, полученного при возбуждении на 405 нм, увеличена в 50 раз. При этом интенсивность полосы кластеров фуллерита при возбуждении на 405 нм в 50 раз меньше интенсивности спектра КРС напряженной вершины алмазной наковальни, а в случае возбуждения на 532 нм эти интенсивности близки.

Спектр КРС напряженной вершины алмазной наковальни состоит из синглетной моды алмаза, смещение которой ($1387 \pm 1 \text{ см}^{-1}$ при давлении 24 ГПа) пропорционально нормальному напряжению на площадке наковальни (давление в образце) и дуплетной моды, которая на спектре рис. 2 сливается со спектром КРС слабо напряженной части алмазной наковальни [14]. Полуширина линии ненапряженной наковальни меньше 3 см^{-1} .

Наблюдаемое увеличение интенсивности спектров КРС, скорее всего, связано с тем, что в результате нагрева меняется длина волны возбуждающего излучения, при которой наблюдается резонансный эффект [10], с 1064 нм [1] на 532 нм.

Для детального сравнения резонансных спектров был получен образец фуллерита при давлении 20–25 ГПа методом инициализации фазового перехода сдвигом при комнатной температуре. Как отмечалось ранее, после снятия давления образец прозрачен в красной области — ближнем ИК диапазоне. При инициализации фазового перехода сдвигом при комнатной температуре резонанс наблюдается при возбуждении на длине волны 1064 нм, как мы отмечали ранее [1]. В случае нагрева резонансный эффект на длине волны 1064 нм не наблюдается (рис. 3).

В спектре КРС образца (2) после нагрева преобладает пик на 1388 см^{-1} , плечо около $\sim 1300 \text{ см}^{-1}$ и пик около $\sim 1200 \text{ см}^{-1}$ (возбуждение 1064 нм). Пики 1200 и 1300 см^{-1} присутствуют также и в резонансных спектрах (рис. 3). Они не относятся к возможным положениям "дисперсных" мод от 1485 см^{-1}

до 1640 см^{-1} [1], которые также активны в резонансных спектрах. В случае резонансного спектра образца (1) при возбуждении на 1064 нм наблюдается линия 1600 см^{-1} , которая отсутствует в образце (2) после нагрева.

В работе [1] приведена зависимость положения “дисперсного” пика от длины волны возбуждающего излучения. На зависимости отсутствовало положение линии при возбуждении на 1064 нм , поскольку при резонансе активны все “дисперсные” моды. Поскольку в нашем эксперименте для образца (2) после нагрева резонанс при возбуждении на 1064 нм отсутствует, мы дополнили эту зависимость недостающим значением 1388 см^{-1} (рис. 4). Примечательно, что это значение легло на линейную зависимость “дисперсной” моды от длины волны возбуждающего излучения в экспериментально исследованном диапазоне от 257 до 1064 нм .

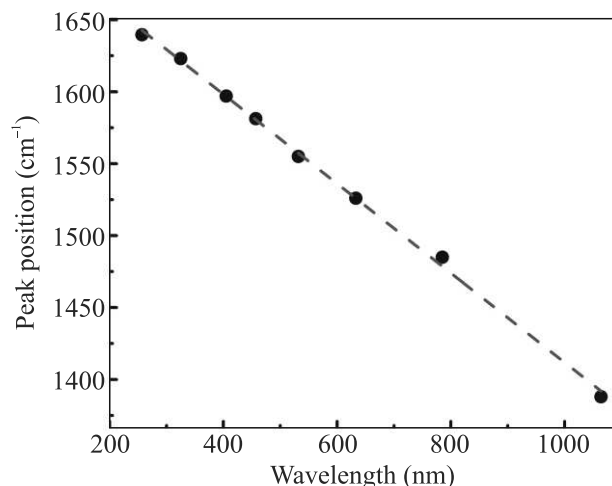


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость положения “дисперсного” пика от длины волны возбуждающего излучения

В нашей работе резонансное усиление спектра образца КРС после нагрева наблюдается при возбуждении на длине волны 532 нм как под давлением (рис. 2), так и после разгрузки (рис. 3). В последнем случае спектр смещен на $\sim 70\text{ см}^{-1}$ в низкочастотную область относительно приведенной в работе [1] огибающей всех возможных положений “дисперсной” линии для образца, полученного при комнатной температуре. На рисунке 3 эта огибающая выделена пунктиром. Такое смещение может свидетельствовать об уменьшении силовых констант и модуля объемного сжатия в образце (2) после нагрева.

Модуль объемного сжатия образца фуллерита после нагрева может быть оценен методом пьезоспек-

троскопии по зависимости линии КРС от давления [1, 11, 15]:

$$B_0 = \gamma_i \omega_0 \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial P} \right)^{-1}, \quad (1)$$

Здесь γ_i — параметр Грюнайзена для квазигармонической моды частоты ω_i (ω_0 соответствует частоте при нулевом давлении, B_0 — модуль объемного сжатия). В общем случае $\gamma_1 \approx 1$ для ковалентно связанных полупроводников IV группы [15]. Модуль объемного сжатия по оценке из выражения (1) $B_0 = 560\text{ ГПа}$, что ниже $B_0 = 644\text{ ГПа}$ для образца, полученного при комнатной температуре [11]. Во всех рассмотренных случаях длина волны возбуждающего излучения была 405 нм .

Смещение резонансного спектра при возбуждении на 532 нм на $\sim 70\text{ см}^{-1}$ в низкочастотную область относительно огибающей всех возможных положений “дисперсной” линии для образца, полученного при комнатной температуре, коррелирует с уменьшением модуля объемного сжатия образца (2) после нагрева до 560 ГПа (644 ГПа при комнатной температуре [11]). Действительно, силовые константы можно оценить по модам КРС из соотношения $\omega^2 \sim k/m$ (динамика решетки), где k — силовая константа, m — приведенная масса, а $B_0 \sim k$ и смещение резонансного спектра на 70 см^{-1} в низкочастотную часть спектра должно соответствовать уменьшению силовых констант/модуля на $\sim 10\%$ (в эксперименте 15%).

Таким образом, нагрев образца фуллерита под давлением $20\text{--}25\text{ ГПа}$ приводит к смещению резонансного КРС в коротковолновую область, что сопровождается уменьшением силовых констант и модуля объемного сжатия. Вдали от резонансного КРС при более коротковолновом возбуждении в процессах КРС участвуют углеродные нанокластеры, образованных sp^3 связями с большим модулем объемного сжатия, чем объясняется зависимость положения “дисперсного” пика от длины волны возбуждающего излучения.

Финансирование работы. Исследования поддерживаются грантом Российского научного фонда (проект # 20-12-00097, <https://rscf.ru/project/20-12-00097/>).

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

1. F. Khorobrykh, S. Klimin, B. Kulnitskiy, F. N. Jalolov, A. Kvashnin, A. Eliseev, A. Kirichenko, V. Prenas, V. Denisov, N. Mel'nik, P. Sorokin, and M. Popov, Carbon **214**, 118314 (2023).
2. Y. Shang, Z. Liu, J. Dong et al. (Collaboration), Nature **599**, 599 (2021).

3. H. Tang, X. Yuan, Y. Cheng, H. Fei, F. Liu, T. Liang, Z. Zeng, T. Ishii, M.-S. Wang, T. Katsura, H. Sheng, and H. Gou, *Nature* **599**, 605 (2021).
4. B. Sundqvist, *Phys. Rep.* **909**, 1 (2021).
5. Y. Shang, M. Yao, Z. Liuet et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **14**, 7860 (2023).
6. Y. Lin, L. Zhang, H.-k. Mao, P. Chow, Y. Xiao, M. Baldini, J. Shu, and W.L. Mao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 175504 (2011).
7. M. Yao, X. Fan, W. Zhang, Y. Bao, R. Liu, B. Sundqvist, and B. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **111**, 101901 (2017).
8. T.B. Shiell, C. deTomas, D.G. McCulloch, D.R. McKenzie, A. Basu, I. Suarez-Martinez, N.A. Marks, R. Boehler, B. Haberl, and J.E. Bradby, *Phys. Rev. B* **99**, 024114 (2019).
9. M. Popov, F. Khorobrykh, S. Klimin, V. Churkin, D. Ovsyannikov, and A. Kvashnin, *Nanomaterials* **13**, 696 (2023).
10. M. Cardona, *Resonance Phenomena*, in: M. Cardona and G. Guntherodt (editors), *Light Scattering in Solids II*, Springer-Verlag, Berlin (1982), p. 19.
11. F. Khorobrykh, B. Kulnitskiy, V. Churkin, E. Skryleva, Y. Parkhomenko, S. Zholudev, V. Blank, and M. Popov, *Diam. Relat. Mater.* **124**, 108911 (2022).
12. S. Anzellini and S. Boccato, *Crystals* **10**, 28 (2020).
13. F. Khorobrykh, B. Kulnitskiy, S. Klimin, and M. Popov, *Diam. Relat. Mater.* **147**, 111380 (2024).
14. M. Popov, *J. Appl. Phys.* **95**, 5509 (2004).
15. B. A. Weinstein and R. Zallen, *Pressure-Raman Effects in Covalent and Molecular Solids*, Springer, Berlin (1984).

Наблюдение резонансной радиационно-столкновительной передачи колебательной энергии в молекулах при лазерном ИК многофотонном возбуждении в двухкомпонентной среде

Г. Н. Макаров¹⁾, А. Н. Петин

Институт спектроскопии РАН, 142190 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 сентября 2024 г.

После переработки 18 сентября 2024 г.

Принята к публикации 19 сентября 2024 г.

Представлены результаты исследований по наблюдению резонансной радиационно-столкновительной передачи колебательной энергии между молекулами при их селективном лазерном ИК многофотонном возбуждении в двухкомпонентной среде. Эксперименты проводились с молекулами BCl_3 природного изотопического состава в смеси с оптически активным сенсibilизатором и акцептором радикалов – молекулами CH_3F . Оба типа молекул резонансно поглощали излучение лазера. Наблюдалась резонансная радиационно-столкновительная передача энергии от молекул CH_3F к молекулам $^{10}\text{BCl}_3$. Показано, что указанный процесс приводит к большому увеличению выхода диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$ по сравнению с выходом диссоциации с нейтральными акцепторами радикалов. Зависимости выходов диссоциации молекул BCl_3 от частоты возбуждающего лазерного излучения показывают структуру, которая хорошо коррелирует со структурой спектра ИК поглощения молекул CH_3F . Описан метод и приведены результаты экспериментов. Обсуждаются условия, при которых реализуется эффективная резонансная радиационно-столкновительная передача колебательной энергии между молекулами при лазерном ИК многофотонном возбуждении.

DOI: 10.31857/S0370274X24100204, EDN: YUPXUU

1. Введение. Процессы передачи энергии между частицами играют важную роль при проведении направленных фотофизических и фотохимических реакций [1–5]. В селективной лазерной ИК фотохимии и фотофизике, включая молекулярное лазерное разделение изотопов, особенно велика роль резонансных радиационно-столкновительных процессов передачи колебательной энергии между молекулами, когда передача энергии происходит одновременно с процессом возбуждения молекул лазером [4–8]. Резонансная передача энергии при этом реализуется за счет того, что молекулы обоих типов одновременно возбуждаются одним и тем же лазером на одной и той же частоте. Такие процессы имеют место при селективном лазерном ИК многофотонном возбуждении и диссоциации молекул с оптически активными сенсibilизаторами – молекулами, которые, как и исследуемые (целевые) молекулы, резонансно поглощают возбуждающее лазерное излучение [9, 10]. Процессы передачи энергии могут приводить к существенному увеличению скорости индуцированных лазером химических реакций, а также к изменению состава образующихся продуктов и парциального соотношения

между ними [2–10]. С другой стороны, они могут также препятствовать проведению направленных реакций и получению желаемых продуктов [2–6, 11, 12].

Передача колебательной энергии от молекул-сенсibilизаторов к исследуемым молекулам во многих случаях используется из-за отсутствия подходящих и мощных лазеров для их возбуждения. Так, на первоначальном этапе исследований по ИК многофотонному возбуждению и диссоциации молекул UF_6 не было мощных лазеров 16-мкм диапазона для возбуждения UF_6 . Поэтому исследования по ИК диссоциации UF_6 проводились с использованием сенсibilизатора SF_6 [13–17]. Молекулы SF_6 использовались также для возбуждения и диссоциации целого ряда других молекул (XeOF_4 [17], SF_5Cl и CF_3I [18], CF_3Cl и $(\text{CF}_3)_3\text{CH}$ [19]).

В качестве сенсibilизатора (донора колебательной энергии) используются молекулы, характеризующиеся большой колебательной теплоемкостью и имеющие интенсивные полосы поглощения в области частот генерации мощных ИК лазеров. Кроме того, желательно, чтобы молекулы-сенсibilизаторы имели более высокую энергию диссоциации, чем исследуемые молекулы. Молекулы SF_6 имеют сильную полосу ИК поглощения в области 10.6-мкм по-

¹⁾e-mail: g.makarov@isan.troitsk.ru

лосы генерации CO_2 -лазера (колебание ν_3 , частота $\approx 948 \text{ см}^{-1}$ [20]). Для возбуждения и диссоциации молекул UF_6 в качестве сенсibilизаторов использовались также и другие молекулы (CF_4 , CF_3Cl , CF_2Cl_2) [14]. Роль сенсibilизаторов состояла в том, чтобы за счет передачи поглощенной ими из лазерного поля энергии возбудить исследуемые молекулы и индуцировать их диссоциацию. Молекулы сенсibilизатора могут и сами сильно возбуждаться лазерным излучением и подвергаться диссоциации. Однако при умеренных плотностях энергии накачки можно реализовать условия, когда исследуемые молекулы подвергаются диссоциации, а молекулы сенсibilизатора – нет [13–17].

В указанных выше работах [13–18] исследуемые молекулы не поглощали лазерное излучение. Они возбуждались за счет передачи энергии от сенсibilизаторов. Недавно были проведены исследования по изотопно-селективному лазерному ИК многофотонному возбуждению молекул с использованием оптически активных сенсibilизаторов – молекул, которые сильно поглощают лазерное излучение на тех же частотах, на которых резонансно возбуждаются исследуемые молекулы [9, 10]. Выполнены также эксперименты по вовлечению молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем за счет использования оптически активных сенсibilизаторов [21, 22].

В условиях, когда исследуемые молекулы и молекулы сенсibilизатора одновременно поглощают излучение лазера, происходит эффективный резонансный столкновительный обмен энергией между молекулами в присутствии лазерного поля, что приводит к сильному возбуждению обоих типов молекул [6–10]. Именно в таких условиях в работах [9, 10] была изучена изотопно-селективная диссоциация молекул $^{11}\text{BCl}_3$ в естественной смеси изотопологов с сенсibilизатором и акцептором радикалов SF_6 . Показано, что использование сенсibilизатора приводит к существенному увеличению эффективности диссоциации молекул $^{11}\text{BCl}_3$. Отсутствие структуры в полосе ИК поглощения колебания ν_3 SF_6 не позволило в работах [9, 10] наглядно продемонстрировать резонансный характер процесса передачи энергии от молекул сенсibilизатора к исследуемым молекулам. В данной работе представлены результаты, которые четко показывают резонансный характер процесса передачи энергии от молекул CH_3F к молекулам $^{10}\text{BCl}_3$. Тем самым установлено, что молекулы CH_3F являются активным сенсibilизатором и акцептором радикалов для эффективной диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$. Полученные результаты важны

в плане реализации лазерного разделения изотопов бора на практике.

2. Установка и метод. Экспериментальная установка (рис. 1) включала в себя перестраиваемый по частоте импульсный CO_2 -лазер, формирующую оптику, газовую кювету из нержавеющей стали для облучения исследуемых молекул длиной 112 мм, объемом 24.2 см^3 , с окнами из KBr, калориметрический (ТПИ-2-5) и пирозлектрические (SensorPhysics Model 510) приемники излучения для измерения падающей и прошедшей через кювету энергии. Импульс излучения CO_2 -лазера состоял из переднего пика длительностью около 80 нс по полувысоте и хвостовой части длительностью $\approx 750 \text{ нс}$, в которой содержалась примерно третья часть энергии лазерного импульса. Лазерное излучение фокусировалось

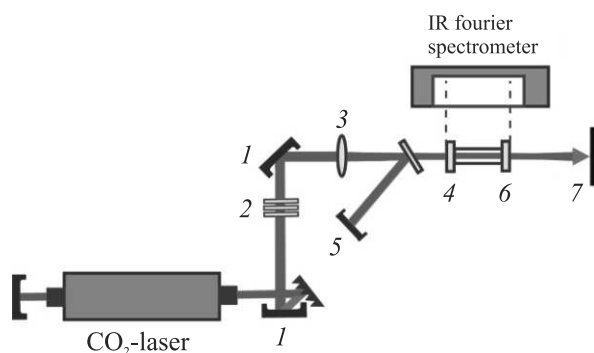
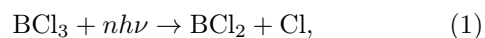


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. 1 – зеркало; 2 – ослабители лазерного излучения; 3 – короткофокусная линза; 4 – делительная пластинка; 5 – приемник излучения; 6 – кювета с облучаемым газом; 7 – поглотитель излучения

в облучаемую кювету линзой из NaCl с фокусным расстоянием $f = 14 \text{ см}$. Размер лазерного пятна в фокальной области линзы был $\approx 0.01 \text{ см}^2$. Энергия излучения лазера в импульсе составляла $\approx 0.4 \text{ Дж}$. Плотность энергии возбуждающего излучения в фокальной области линзы достигала $\approx 40 \text{ Дж/см}^2$. Частота излучения лазера перестраивалась в диапазоне от 973.3 до 986.6 см^{-1} (линии генерации лазера 10R(16)–10R(38)). Для привязки частоты линий излучения CO_2 -лазера использовался оптико-акустический приемник с реперным газом NH_3 .

Лазерная ИК многофотонная диссоциация молекул BCl_3 протекает [2, 3] по схеме:



где $nh\nu$ обозначает количество поглощенных лазерных ИК фотонов.

При облучении молекул на указанных выше частотах генерации лазера продукты диссоциации обогащались изотопом ^{10}B , а остаточный после облучения газ BCl_3 обогащался изотопом ^{11}B . Выходы диссоциации, которые представляют собой доли распавшихся в облучаемом объеме молекул за один лазерный импульс, определялись по изменениям интенсивности полос в ИК спектрах поглощения для каждой из изотопных компонент BCl_3 . Спектры поглощения измерялись с помощью ИК фурье-спектрометра ФТ-801. Выходы диссоциации β_{10} и β_{11} вычислялись по парциальному давлению каждой компоненты $^i\text{BCl}_3$ ($i = 10, 11$) до ($p_{i,0}$) и после (p_i) облучения лазерными импульсами с использованием соотношения

$$\beta_i = \Gamma^{-1}[1 - (p_i/p_{i,0})^{1/N}], \quad (2)$$

где $\Gamma \approx 0.02$ – отношение облучаемого объема ($V_{irr} \approx 0.48 \text{ см}^3$) к объему кюветы ($V_{cell} = 24.2 \text{ см}^3$), N – число импульсов облучения. Селективность $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B})$ определялась как отношение выходов диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$:

$$\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B}) = \beta_{10}/\beta_{11}. \quad (3)$$

Молекулы $^{11}\text{BCl}_3$ и $^{10}\text{BCl}_3$ имеют интенсивные полосы поглощения с центрами соответственно около 954.2 см^{-1} и 993.7 см^{-1} , которые соответствуют асимметричным колебаниям моды ν_3 связи B–Cl [23]. Изотопический сдвиг между указанными полосами поглощения составляет $\Delta\nu_{is} \approx 39.5 \text{ см}^{-1}$ [23]. Полоса поглощения колебания ν_3 молекул CH_3F (частота Q-ветви 1048.61 см^{-1} [24]) примерно на 54.9 см^{-1} смещена в высокочастотную сторону от центра полосы поглощения молекул $^{10}\text{BCl}_3$ (993.7 см^{-1} [23]) (см. рис. 2а–с).

Однако ряд колебательно-вращательных линий R-ветви полосы ИК поглощения молекул CH_3F совпадают с полосой поглощения молекул $^{10}\text{BCl}_3$. При лазерном ИК многофотонном возбуждении CH_3F спектр поглощения возбужденных молекул смещается из-за ангармонизма колебаний в красную сторону, что приводит их к лучшему резонансу с лазерным полем [2, 3, 21, 22, 25]. Это дает возможность при изотопно-селективной диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ использовать молекулы CH_3F одновременно в качестве сенситизатора и акцептора радикалов.

Следует отметить, что молекулы CH_3F , как и молекулы BCl_3 , имеют довольно большую энергию диссоциации ($\text{BCl}_3 - \approx 110 \text{ ккал/моль}$, $\text{CH}_3\text{F} - \approx 112 \text{ ккал/моль}$ по каналу образования $\text{CH}_3 + \text{F}$ и $\approx 110.2 \text{ ккал/моль}$ по каналу образования $\text{CH}_2\text{F} + \text{H}$ [26]). Поэтому при сравнительно высоких плотностях

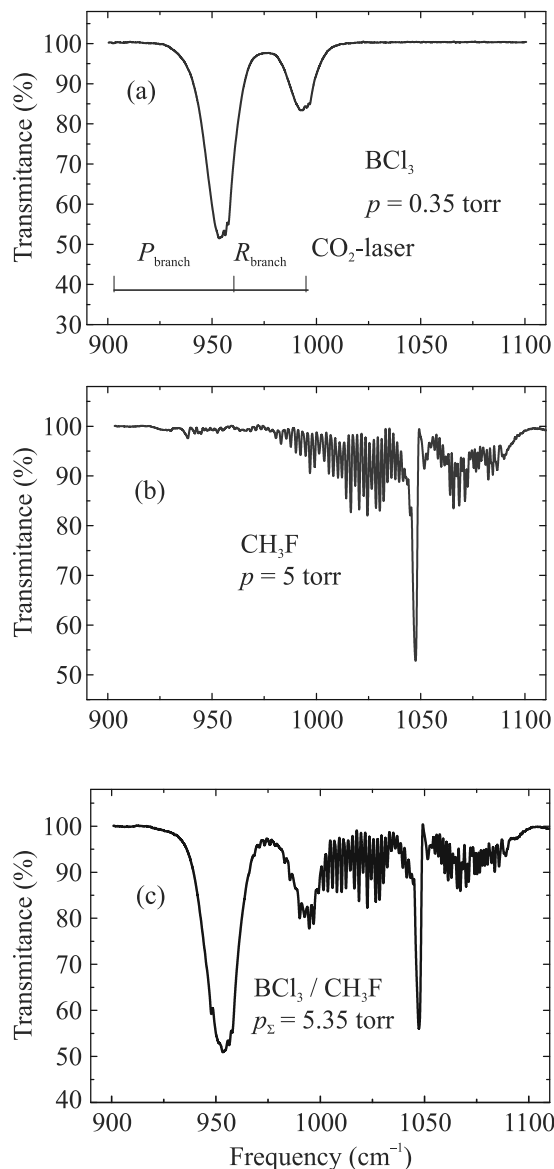


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Полосы ИК поглощения колебаний ν_3 молекул $^{11}\text{BCl}_3$ и $^{10}\text{BCl}_3$. Давление BCl_3 в кювете – 0.35 торр, длина кюветы – 11.2 см. (б) – Полоса ИК поглощения колебания ν_3 молекул CH_3F . Давление CH_3F в кювете – 5 торр. (с) – Полосы ИК поглощения колебаний ν_3 молекул $^{11}\text{BCl}_3$, $^{10}\text{BCl}_3$ и CH_3F . Давление BCl_3 в кювете – 0.35 торр, CH_3F – 5 торр

энергии возбуждения могла иметь место диссоциация и молекул CH_3F . Однако молекулы CH_3F характеризуются значительно большей, чем молекулы BCl_3 , величиной ангармонизма колебаний возбуждаемой лазером моды ν_3 ($\Delta\nu_{anh} \approx 3.3 \text{ см}^{-1}$ для BCl_3 [27] и $\Delta\nu_{anh} \approx 15.8 \text{ см}^{-1}$ для CH_3F [28]), что затрудняет процесс их многофотонного возбуждения [2, 3]. При используемых нами плотностях энергии возбуждения ($\Phi \leq 40 \text{ Дж/см}^2$) эффективная диссоциация молекул CH_3F (без BCl_3) не происходила.

3. Результаты и их обсуждение. На рисунке 2а–с приведены спектры линейного ИК поглощения молекул BCl_3 (а), CH_3F (б) и смеси молекул BCl_3 с CH_3F (с) в области частот, на которых молекулы возбуждались лазером, полученные со спектральным разрешением 0.5 см^{-1} с помощью спектрометра ФТ-801. При таком разрешении тонкая структура отдельных линий поглощения молекул CH_3F не разрешалась. В нижней части рис. 2а показаны участки *P*- и *R*-ветвей 10.6-мкм полосы генерации CO_2 -лазера. Частотные отстройки между некоторыми используемыми в экспериментах линиями генерации лазера и линиями поглощения молекул CH_3F составляют $\leq 0.1 \text{ см}^{-1}$ [29]. Наименьшие частотные отстройки реализуются для линий лазера 10R(16), 10R(24), 10R(30) и 10R(36) [29]. При возбуждении смеси молекул $\text{BCl}_3 + \text{CH}_3\text{F}$ можно ожидать проявления структуры в спектральной зависимости выхода диссоциации молекул BCl_3 , хотя многофотонное поглощение молекул в сильном ИК поле лазера может сильно повлиять на спектральную зависимость выхода диссоциации [2, 3]. В экспериментах при возбуждении молекул $\text{BCl}_3 + \text{CH}_3\text{F}$ именно на этих линиях генерации лазера нами наблюдались максимумы в выходах диссоциации молекул BCl_3 .

Рисунок 3 демонстрирует методику измерений. На нем показаны спектры ИК поглощения смеси молекул $\text{BCl}_3 + \text{CH}_3\text{F}$ (при давлении $0.35 + 5.0$ торр) до облучения (1) и после облучения (2) лазером на частоте 983.25 см^{-1} (на линии 10R(32) лазера). Энергия возбуждающего лазерного излучения составляла около 0.3 Дж. Видно, что в результате облучения происходит диссоциация молекул BCl_3 , причем как $^{10}\text{BCl}_3$, так и $^{11}\text{BCl}_3$. При этом большого расхода газа CH_3F не наблюдается. Следует особо отметить, что в результате облучения BCl_3 в смеси с CH_3F образуется продукт BCl_2F . Полоса поглощения колебания ν_4 молекул $^{11}\text{BCl}_2\text{F}$ (частота 993.7 см^{-1} [23]) практически совпадает с полосой поглощения колебания ν_3 молекул $^{10}\text{BCl}_3$ (накладывается на нее) [23]. В результате полученные нами данные по расходу $^{10}\text{BCl}_3$ значительно занижены. Это не давало также возможности определять селективность диссоциации $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B})$ молекул BCl_3 по расходу газа.

Основное внимание в экспериментах было уделено измерению выхода диссоциации молекул BCl_3 по расходу $^{11}\text{BCl}_3$. На полосу поглощения молекул $^{11}\text{BCl}_3$ никакие полосы поглощения продуктов не накладывались. При этом полагалось, что селективность диссоциации молекул BCl_3 в проводимых нами экспериментах сопоставима с селективностью их диссоциации с другими акцепторами радикалов [9, 10],

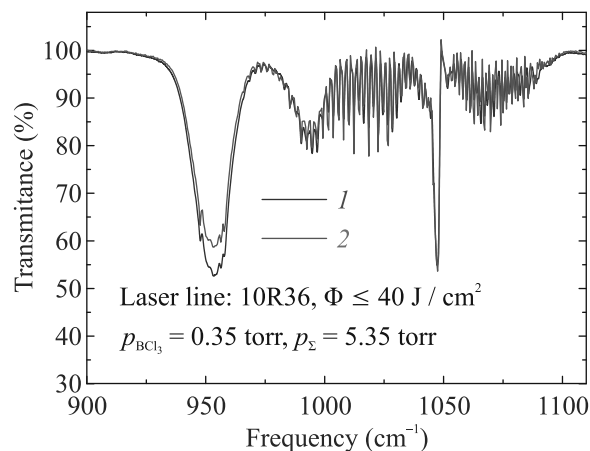


Рис. 3. (Цветной онлайн) Полосы ИК поглощения колебаний ν_3 молекул $^{11}\text{BCl}_3$, $^{10}\text{BCl}_3$ и CH_3F до облучения (1) и после облучения (2) лазером. Исходное давление BCl_3 в кювете – 0.35 торр, CH_3F – 5 торр. Плотность энергии возбуждающего лазерного излучения $\leq 40 \text{ Дж/см}^2$. Число импульсов облучения $N = 900$

и она составляет $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B}) \approx 2.5\text{--}3.5$ (см. работы [30, 31]). Кроме того, на полосу поглощения молекул $^{10}\text{BCl}_3$ накладывались линии поглощения молекул CH_3F (см. рис. 2с и 3), что также ограничивало уменьшение интенсивности полосы поглощения $^{10}\text{BCl}_3$ за счет облучения. Поэтому в представленных нами на рис. 4 и 5 данных выходы диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ определены неточно, они занижены. Данные по выходу диссоциации $^{10}\text{BCl}_3$ приведены нами лишь для качественного сравнения с данными по измерению выхода диссоциации молекул $^{11}\text{BCl}_3$. Для точного определения выхода, а также селективности диссоциации $^{10}\text{BCl}_3$ с использованием сенсibilизатора CH_3F требуется проводить масс-спектрометрический анализ остаточного после облучения газа BCl_3 .

На рисунке 4 приведены зависимости выходов диссоциации молекул $^{11}\text{BCl}_3$ и $^{10}\text{BCl}_3$ от частоты возбуждающего излучения CO_2 -лазера.

Молекулы возбуждались на линиях 10R(16)–10R(38). Энергия лазерного импульса – 0.3 Дж. Облучалась смесь 0.35 торр $\text{BCl}_3 + 5$ торр CH_3F . Установлено, что структура в зависимостях выходов диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$ от частоты возбуждающего излучения довольно хорошо коррелирует со структурой спектра линейного ИК поглощения колебания ν_3 молекул CH_3F , состоящей из отдельных колебательно-вращательных линий поглощения (рис. 2б). Максимальные выходы диссоциации $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$ наблюдаются при возбуждении молекул именно на тех линиях гене-

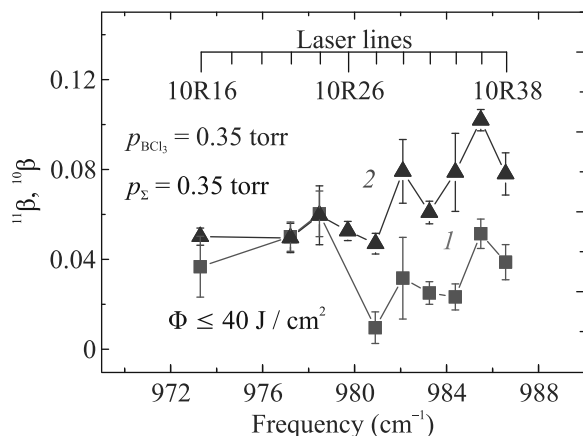


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости выходов диссоциации β_{10} (1) и β_{11} (2) от частоты возбуждающего лазерного излучения. Область перестройки линий лазера: 10R(16)–10R(38). Давление газа в кювете: 0.35 торр BCl_3 + 5 торр CH_3F . В верхней части рисунка показано частотное положение линий генерации CO_2 -лазера, на которых возбуждались молекулы

рации лазера (R(24), R(30) и R(36)), для которых реализуются минимальные частотные отстройки от линий поглощения молекул CH_3F [29]. Полученные результаты ясно показывают резонансный характер процесса передачи энергии от молекул CH_3F к молекулам BCl_3 .

На рисунке 5 показаны зависимости выходов диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$ от давления сенсibilизатора и акцептора радикалов CH_3F . Заметим сразу, что без CH_3F выход диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ больше таковой $^{11}\text{BCl}_3$. Селективность диссоциации $^{10}\text{BCl}_3$ составляла $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B}) \approx 3.5$ (см. рис. 5). С использованием CH_3F , как отмечено выше, измерять селективность мы не могли, поскольку на полосу поглощения молекул $^{10}\text{BCl}_3$ накладывались полосы поглощения продукта $^{11}\text{BCl}_2\text{F}$ и сенсibilизатора. Как видно на рис. 5, в исследуемом диапазоне выходы диссоциации молекул BCl_3 монотонно растут с увеличением давления CH_3F и увеличиваются почти на 2 порядка (в 60–80 раз) при увеличении давления CH_3F примерно от 1.0 до 15 торр. Этот результат существенно отличается от результатов, полученных ранее в случае ИК диссоциации молекул BCl_3 с другими акцепторами радикалов, таких как O_2 , H_2 , NO , HBr , H_2S и другие [30–33], которые не поглощают возбуждающее молекулы BCl_3 лазерное излучение. В случае использования оптически нейтральных акцепторов радикалов выход диссоциации молекул BCl_3 с ростом давления акцепторного газа увеличивался всего в 2–3 раза, а оптимальная величина выхода диссоциации BCl_3 достигалась при давлении

буферных газов 5–10 торр [30–33]. При дальнейшем увеличении давления буферного газа наблюдалась дезактивация возбужденных молекул и уменьшение их выхода диссоциации. Показано также, что в плане получения сравнительно высоких значений селективности и выхода диссоциации молекул BCl_3 хорошим акцептором радикалов является кислород [32, 33]. Полученные нами зависимости выходов диссоциации молекул BCl_3 от частоты возбуждающего

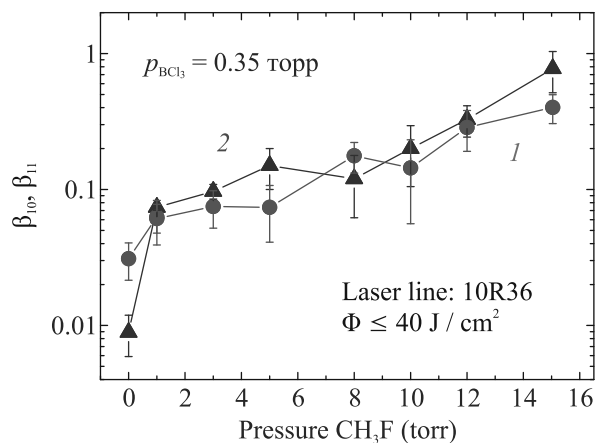


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимости выходов диссоциации β_{10} (1) и β_{11} (2) от давления сенсibilизатора и акцептора радикалов CH_3F . Давление газа BCl_3 в кювете – 0.35 торр, плотность энергии возбуждающего лазерного излучения ≤ 40 Дж/см²

излучения и от давления сенсibilизатора и акцептора радикалов CH_3F четко показывают, что именно за счет передачи колебательной энергии от молекул CH_3F исследуемым молекулам $^{10}\text{BCl}_3$ происходит существенное увеличение выхода диссоциации BCl_3 . Эффективная передача колебательной энергии от молекул CH_3F к молекулам $^{10}\text{BCl}_3$ происходит ввиду резонансного характера процесса передачи энергии [1, 14, 25, 34]. В результате последующего довольно быстрого столкновительного процесса колебательно-колебательного $V \leftrightarrow V$ обмена энергий между молекулами $^{10}\text{BCl}_3$ и $^{11}\text{BCl}_3$ (константа скорости $\tau_{V-V} \approx 0.5$ мкс · торр [24]) происходит возбуждение также и не поглощающих лазерное излучение молекул $^{11}\text{BCl}_3$. Константа скорости колебательно-поступательной релаксации молекул BCl_3 в собственном газе составляет $\tau_{V-T} \approx 5.8$ мкс · торр, а в CH_3F – $\tau_{V-T} \approx 15.3$ мкс · торр [24]. Поскольку полная длительность возбуждающего лазерного импульса составляла ≈ 0.75 мкс, в проведенных нами экспериментах реализовывался преимущественно радиационно-столкновительный режим возбуждения молекул.

Газообразные продукты, которые образовывались в результате лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул BCl_3 в смеси с CH_3F и последующих химических реакций, идентифицировались по их спектрам ИК поглощения в спектральной области примерно от 750 см^{-1} до 3600 см^{-1} . Установлено, что основными конечными продуктами являются $^{10}\text{BCl}_2\text{F}$ и $^{11}\text{BCl}_2\text{F}$, $^{10}\text{BClF}_2$ и $^{11}\text{BClF}_2$, а также HCl .

4. Заключение. Изучена резонансная передача колебательной энергии при изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул BCl_3 в смеси с оптически активным сенсibilизатором и акцептором радикалов – молекулами CH_3F . Молекулы CH_3F имеют структурированную полосу ИК поглощения, перекрывающуюся с полосой поглощения молекул $^{10}\text{BCl}_3$, что позволяет наблюдать процесс резонансной радиационно-столкновительной передачи колебательной энергии от молекул CH_3F к молекулам $^{10}\text{BCl}_3$.

Показано, что зависимости выходов диссоциации молекул BCl_3 от частоты возбуждающего лазерного излучения имеют структуру, которая хорошо коррелирует со структурой спектра ИК поглощения колебания ν_3 молекул CH_3F . Установлено, что указанный процесс приводит к значительному (более, чем в 5–10 раз) увеличению выхода диссоциации молекул $^{10}\text{BCl}_3$ по сравнению с выходом диссоциации при облучении с нейтральными акцепторами радикалов.

Полученные результаты четко показывают резонансный характер индуцированных мощным ИК лазером процессов передачи энергии от молекул сенсibilизатора CH_3F к исследуемым молекулам $^{10}\text{BCl}_3$ и представляют большой интерес в плане применения лазерных методов для разделения изотопов бора на практике.

Финансирование работы. Исследование выполнено в рамках государственного задания FFUU-2022-0004.

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

1. J. T. Yardley, in *Introduction to Molecular Energy Transfer*, Academic, N.Y. (1980), p. 130.
2. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ., Chur (1985).
3. C. D. Cantrell (editor), *Multiple-Photon Excitation and Dissociation of Polyatomic Molecules*, Topics in Current Physics, Springer-Verlag, Berlin (1986), v. 35.
4. Г. Н. Макаров, УФН **192**, 569 (2022).
5. Г. Н. Макаров, УФН **194**, 48 (2024).
6. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **112**, 226 (2020).
7. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Квантовая электроника **50**, 1036 (2020).
8. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **159**, 281 (2021).
9. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **117**, 734 (2023).
10. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **165**, 14 (2024).
11. В. Б. Лаптев, Е. А. Рябов, Квантовая электроника **13**, 2368 (1986).
12. В. Б. Лаптев, Е. А. Рябов, Химическая физика **7**, 165 (1988).
13. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, Chem. Phys. Lett. **78**, 273 (1981).
14. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, Appl. Phys. B **53**, 108 (1991).
15. K. C. Kim, S. Freund, R. K. Sander, D. F. Smith, and W. B. Person, J. Chem. Phys. **78**, 32 (1983).
16. C. Chin, H. Hou, Yi. Bao, and T. Li, Chem. Phys. Lett. **101**, 69 (1983).
17. C. Angelie, M. Cauchetier, and J. Paris, Chem. Phys. **66**, 129 (1982).
18. M. Cauchetier, M. Luce, and C. Angelie, Chem. Phys. Lett. **88**, 146 (1982).
19. В. Н. Баграташвили, В. Н. Буримов, Л. Е. Деев, В. И. Носков, А. П. Свиридов, Квантовая электроника **10**, 1682 (1983).
20. R. S. McDowell, B. J. Krohn, H. Flicker, and M. C. Vasquez, Spectrochim. Acta **42A**, 351 (1986).
21. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **115**, 292 (2022).
22. В. Б. Лаптев, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **162**, 60 (2022).
23. D. F. Wolfe and G. L. Humphrey, J. Mol. Struct. **3**, 293 (1969).
24. P. L. Houston, A. V. Nowak, and J. I. Steinfeld, J. Chem. Phys. **58**, 3373 (1973).
25. Г. Н. Макаров, Письма в ЖЭТФ **115**, 703 (2022).
26. В. Н. Кондратьев (ред.), *Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону*, Наука, М. (1974).
27. Н. В. Карлов, Ю. Н. Петров, А. М. Прохоров, О. М. Стельмах, Письма в ЖЭТФ **11**, 220 (1970).
28. A. Owens, A. Yachmenev, J. Kupper, S. N. Yurchenko, and W. Thie, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 3496 (2018).
29. D. G. Biron, R. J. Temkin, B. Lax, and B. G. Danly, Opt. Lett. **4**, 381 (1979).
30. Ю. Р. Коломийский, Е. А. Рябов, Квантовая электроника **5**, 651 (1978).

- 31. Z. Peiran, Z. Wensen, and Z. Yuying, Chinese J. Lasers **8**(10), 20 (1981).
- 32. Р. В. Амбарцумян, Ю. А. Горохов, В. С. Летохов, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, Квантовая электроника **2**, 2197 (1975).
- 33. Р. В. Амбарцумян, Ю. А. Горохов, В. С. Летохов, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, Квантовая электроника **3**, 802 (1976).
- 34. В. У. Mohan, J. Chem. Phys. **46**, 98 (1967).

Реконструкция двумерных турбулентных течений и их параметров с помощью физически-информированных нейронных сетей

В. Парфеньев⁺⁺¹⁾, М. Блуменау^{*×}, И. Никитин⁺⁺

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

^{*}Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

[×]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 июня 2024 г.

После переработки 2 сентября 2024 г.

Принята к публикации 8 сентября 2024 г.

Определение параметров системы и полного состояния потока на основе ограниченных измерений скорости может быть чрезмерно трудоемким при использовании классических алгоритмов ассимиляции данных. В этой работе мы применяем алгоритмы машинного обучения для решения этой проблемы. В качестве примера мы рассматриваем умеренно турбулентное течение жидкости, возбуждаемое стационарной силой и описываемое двумерным уравнением Навье–Стокса с линейным трением о дно. Основываясь на плотных во времени, разреженных в пространстве и, вероятно, зашумленных данных о скорости, мы с высоким пространственным разрешением реконструируем поле скорости, восстанавливаем давление и внешнюю силу с точностью до гармонической функции и ее градиента, соответственно, а также определяем неизвестные вязкость жидкости и коэффициент трения о дно. Валидация метода производится путем анализа среднеквадратичных ошибок реконструкций и их энергетических спектров. Мы исследуем зависимость этих метрик от степени разреженности и зашумленности исходных измерений скорости. Наш подход основан на обучении физически-информированных нейронных сетей путем минимизации функции потерь, которая штрафует за отклонение от предоставленных данных и нарушение физических уравнений. Предлагаемый алгоритм извлекает дополнительную информацию из измерений скорости, потенциально расширяя возможности методов PIV/PTV.

DOI: 10.31857/S0370274X24100215, EDN: XOTOTD

1. Введение. Экспериментальные исследования течений жидкости предполагают измерение их характеристик. Собранные данные могут обладать низким пространственно-временным разрешением или быть искажены измерительным шумом. Иногда величина, представляющая интерес, не может быть измерена напрямую, и ее приходится реконструировать на основе других измерений (например, давление можно определить по известному полю скорости [1]). Различные методы ассимиляции данных, основанные на сопряженных и ансамблевых вариациях, решают эти задачи, объединяя экспериментальные данные с численным моделированием [2, 3]. Основная идея состоит в том, чтобы найти состояние потока, которое удовлетворяет уравнению Навье–Стокса и минимизирует отклонение от наблюдений. Фундаментальный недостаток такого подхода заключается в вычислительной сложности, необходимой для проведения множества численных симуляций с различными начальными

условиями и неизвестными параметрами системы, которые подбираются в процессе оптимизации. Как только они найдены, связанная с ними эволюция течения дает доступ к полному состоянию системы и с намного большим разрешением, чем исходные данные.

Недавно был предложен альтернативный подход, в котором численный солвер заменяется на физически-информированную нейронную сеть (англ. PINN (Physics-Informed Neural Network)) [4]. Реконструкция течения также рассматривается как задача минимизации. Нейронная сеть получает на вход координаты и момент времени, а на выходе возвращает величины, характеризующие состояние течения. Функция потерь штрафует за отклонение от имеющихся данных и нарушение основных уравнений. Подчеркнем, что теперь основные уравнения не соблюдаются строго, вместо этого соответствующий дисбаланс используется в качестве штрафа в задаче оптимизации. Главными преимуществами такого подхода являются относительная простота реализации и лучшая применимость для плохо определен-

¹⁾e-mail: parfenius@gmail.com

ных задач. В частности, PINN могут использоваться в областях с неизвестными граничными условиями [5], тогда как численное моделирование в этом случае невозможно.

Детальное сравнение обоих методов было проведено в работе [6], где было показано, что PINN, как правило, менее точны для разреженных данных. Однако в будущем ситуация может измениться, поскольку PINN – это относительно новая технология, которая в настоящее время активно совершенствуется. Примеры применения этого метода ко все более сложным конфигурациям течений можно найти в недавних обзорах [7–9].

В этой работе мы применяем PINN к конкретному примеру двумерной турбулентности, мотивированному экспериментальными исследованиями [10–13]. Мы полагаем, что проводимые измерения позволяют определить скорость жидкости в некоторых точках пространства и времени. Эти данные, например, могут быть получены с помощью методов PIV/PTV (англ. Particle Image/Tracking Velocimetry), которые отслеживают положения частиц, помещенных в поток жидкости, в последовательные моменты времени для определения поля скорости. Собранные данные предполагаются плотными во времени, но могут быть разреженными в пространстве и содержать ошибки измерений. Плотность во времени означает, что методы PIV/PTV позволяют измерять мгновенную скорость потока с разумной точностью. Разреженность в пространстве подразумевает, что мы хотим разрешать масштабы, которые малы по сравнению с характерным расстоянием между точками измерений. Методы ассимиляции данных, которые мы обсуждаем, связывают последовательные моменты времени, воспроизводя динамику, определяемую уравнением Навье–Стокса. Это позволяет комбинировать информацию о поле скорости из разных моментов времени, повышая точность и пространственное разрешение возможных реконструкций.

Наша цель – улучшить экспериментальные данные за счет повышения их пространственного разрешения и определения характеристик потока и параметров системы, которые не были измерены напрямую. В частности, мы хотим реконструировать пространственно плотные поля скорости и давления, определить внешнюю силу, а также неизвестную вязкость жидкости и коэффициент трения о дно, основываясь только на измерениях скорости. Знание этих дополнительных величин позволит нам лучше описать и охарактеризовать свойства рассматриваемой системы. Настоящее исследование дополняет недав-

ние работы [14–17], анализируя другую конфигурацию потока.

Проведенный анализ показывает, что разреженных (150 векторов на изображение), но точных измерений скорости достаточно для реконструкции плотного (65536 векторов на изображение) поля скорости с относительной среднеквадратичной ошибкой около 0.2% и столь же плотных полей давления и внешней силы с точностью в несколько раз хуже для типичных экспериментальных условий. Вязкость жидкости и трение о дно восстанавливаются с относительной ошибкой в несколько процентов. Разработанный метод устойчив к небольшому шуму ($\leq 1\%$) в исходных данных для скорости и даже способен исправлять ошибки измерений, основываясь на том факте, что восстановленные величины должны удовлетворять уравнению Навье–Стокса и условиям несжимаемости. По мере увеличения уровня шума в исходных данных точность восстановления снижается. Мы также анализируем изменение точности реконструкций в зависимости от плотности измерений скорости. Анализ энергетических спектров показывает, что малые масштабы восстанавливаются хуже всего, особенно при зашумленных измерениях.

2. Основные уравнения. Мы рассматриваем двумерное течение несжимаемой $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ жидкости, описываемое уравнением Навье–Стокса:

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p - \alpha \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}, \quad (1)$$

где $\mathbf{v}$ – двумерное поле скорости, p – давление, α – трение о дно и ν – кинематическая вязкость. Внешняя сила $\mathbf{f}$ предполагается стационарной во времени. Нас интересует умеренно турбулентный режим, для которого нелинейное слагаемое в уравнении Навье–Стокса играет существенную роль. Наблюдение за течением происходит в некоторой области с открытыми границами, и для его изучения мы измеряем поле скорости. У нас нет никакой информации о поле давления и внешней силе, за исключением того, что последние постоянны во времени.

Важно понимать, что в такой постановке задачи давление и внешняя сила не могут быть четко разделены. Действительно, проводя разложение Гельмгольца, внешнюю силу можно представить как сумму градиентного и соленоидального полей. Градиентный вклад может быть включен в определение давления, и тогда, без потери общности, внешнюю силу в уравнении (1) можно считать соленоидальной, т.е. $\nabla \cdot \mathbf{f} = 0$. Однако, даже принимая во внимание это условие, разделение давления и внешней силы все равно не является однозначным. Эти величины определены с точностью до преобразований

$p(\mathbf{r}, t) \rightarrow p(\mathbf{r}, t) + h(\mathbf{r}) + c(t)$, $f(\mathbf{r}) \rightarrow f(\mathbf{r}) + \nabla h(\mathbf{r})$, где $h(\mathbf{r})$ – гармоническая функция $\nabla^2 h(\mathbf{r}) = 0$ в зоне наблюдений, а $c(t)$ – произвольная функция, не зависящая от пространственных координат. Однозначное определение $h(\mathbf{r})$ и $c(t)$ невозможно без знания граничных условий для давления и внешней силы на краях наблюдаемой области. Отметим, что $h(\mathbf{r})$ не зависит от времени, поскольку предполагается, что внешняя сила статична.

Вышеизложенное следует иметь в виду при определении точности работы алгоритма. В дальнейшем, чтобы характеризовать ошибки восстановления поля давления и внешней силы, мы будем сравнивать значения их лапласиана $\nabla^2 p$ и ротора $\phi = \partial_x f_y - \partial_y f_x$, соответственно. Знание динамики поля скорости позволяет нам однозначно определить эти величины.

3. Генерация данных. Данные для этого исследования получены численным интегрированием уравнения (1) при помощи пакета GeophysicalFlows.jl [18], который ранее успешно применялся для моделирования двумерной турбулентности [19–21]. Код может быть исполнен на графических процессорах, что обеспечивает высокую производительность. Ошибки совмещения гармоник устраняются при помощи правила двух третей. Моделирование проводится в дважды периодической области размером $2\pi \times 2\pi$. Измерения скорости осуществляются в области наблюдений, которая меньше и имеет размер $L \times L$, где $L = \pi$, см. рис. 1а. Поскольку граничные условия на краях зоны наблюдений неизвестны, применение методов ассимиляции данных, основанных на сопряженных и ансамблевых вариациях, затруднено.

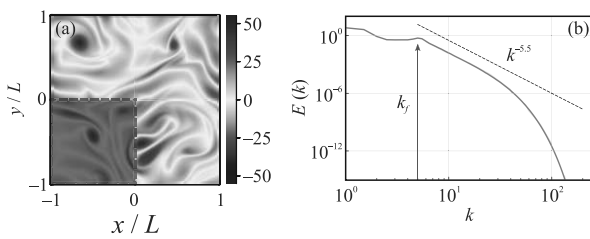


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Поле завихренности и (б) – энергетический спектр в статистически стационарном состоянии. Затененная область соответствует зоне наблюдений

Параметры системы $\nu = 0.01$ и $\alpha = 0.1$ выбраны в согласии с экспериментом [11]. Внешняя сила имеет вид Колмогорова:

$$f_x = f_0 \sin(k_f y), \quad f_y = 0, \quad (2)$$

где $f_0 = 10$ и $k_f = 5$. Начальное условие может быть произвольным, поскольку после переходного процес-

са течение достигает статистически-стационарного состояния. В этом режиме мы сохраняем данные с шагом $\Delta t = 0.02$ на протяжении $T = 4$, что соответствует нескольким оборотам флуктуаций течения. Такая частота записи данных моделирует запись видео с частотой 50 кадров в секунду в лабораторном эксперименте. Пространственное разрешение прямого численного моделирования (англ. DNS (Direct Numerical Simulation)) составляет 512^2 точек для всей расчетной области и 256^2 для зоны наблюдений.

Рисунок 1а показывает поле завихренности $\omega = \partial_x v_y - \partial_y v_x$ в статистически-стационарном состоянии. Течение хаотично и не содержит явного отпечатка внешней силы. Поскольку в задаче присутствуют два механизма диссипации (вязкость и трение о дно), то состояние системы можно описать двумя безразмерными параметрами [22]: числом Рейнольдса $Re = UL/\nu \approx 1.3 \times 10^3$ и $Rh = U/(\alpha L) \approx 13$, где мы воспользовались среднеквадратичной скоростью потока $U \approx 4.1$ и размером области наблюдений $L = \pi$. Энергетический спектр показан на рис. 1б. Он демонстрирует, что течение в основном определяется модами с волновыми векторами $k \lesssim k_f$.

Для имитации измерений скорости мы случайным образом выбираем N_{data} точек $\{\mathbf{r}_n^d, t_n^d\}_{n=1}^{N_{\text{data}}}$ в пространственно-временной $(256 \times 256 \times 200)$ области наблюдений. Мы рассматриваем случай, когда среднее расстояние между точками измерений для одного момента времени сравнимо с масштабом внешней силы или превышает его. Оказывается, что настолько разреженных данных достаточно для реконструкции полей и определения параметров системы с хорошей точностью. В экспериментах, на которые мы опираемся, пространственное разрешение измерений скорости обычно гораздо выше. В такой ситуации имеет смысл проредить измеренное поле скоростей, выбирая случайным образом небольшое число точек, что значительно ускоряет реконструкцию. Основная цель в данном случае – определить параметры системы и величины, которые не могут быть измерены напрямую. Если экспериментальные данные изначально разрежены в пространстве, то расположение точек измерений в близкие моменты времени может иметь некоторую пространственную корреляцию, которую мы не учитываем в нашей модели измерений. Влияние таких корреляций на точность реконструкции требует дальнейшего исследования и выходит за рамки данной работы.

Измеренная скорость $\mathbf{v}^d(\mathbf{r}_n^d, t_n^d)$ может отличаться от DNS данных $\mathbf{v}(\mathbf{r}_n^d, t_n^d)$ из-за экспериментальных ошибок. Мы моделируем этот шум как

$$\mathbf{v}^d = \begin{pmatrix} 1 + \eta_1 & 0 \\ 0 & 1 + \eta_2 \end{pmatrix} \mathbf{v}, \quad (3)$$

где $\eta_i \sim \mathcal{N}(0, \varepsilon^2)$ – независимые нормально распределенные случайные величины, а стандартное отклонение ε контролирует интенсивность шума. Идеальные данные соответствуют $\varepsilon = 0$. Заметим, что такой простой подход учитывает только ошибки в определении амплитуды скорости и игнорирует ошибки, связанные с определением положения вектора скорости в пространстве.

В большинстве примеров ниже мы используем $N_{\text{data}} = 3 \times 10^4$, если явно не указано другое значение. В среднем это соответствует 150 точкам измерений на снимок в сравнении с 65536 точками при полном разрешении. Собранные данные $\mathbf{v}^d(\mathbf{r}_n^d, t_n^d)$ используются для последующей реконструкции течения и параметров системы с помощью PINN.

4. Физически-информированная нейронная сеть. В этом разделе мы подробно описываем метод PINN, применяемый в исследовании. Мы одновременно обучаем две независимые нейронные сети, см. рис. 2а. Первая нейронная сеть аппроксимирует поля скорости и давления в некоторой точке пространства и времени. У этой сети есть три входных и три выходных нейрона, $(\hat{v}_x, \hat{v}_y, \hat{p}) = \mathcal{F}_{\theta_1}(x, y, t)$. Вторая нейронная сеть предназначена для предсказания внешней силы и имеет по два нейрона на входе и выходе, $(\hat{f}_x, \hat{f}_y) = \mathcal{G}_{\theta_2}(x, y)$. Векторами θ_1 и θ_2 обозначены обучаемые параметры сетей. Кроме того, мы будем предполагать, что трение о дно и кинематическая вязкость жидкости нам неизвестны. Так как эти величины положительны, удобно представить их в виде $\hat{\alpha} = e^{\lambda_1}$ и $\hat{\nu} = e^{\lambda_2}$. Скалярные параметры λ_1 и λ_2 будут корректироваться во время обучения PINN вместе с θ_1 и θ_2 .

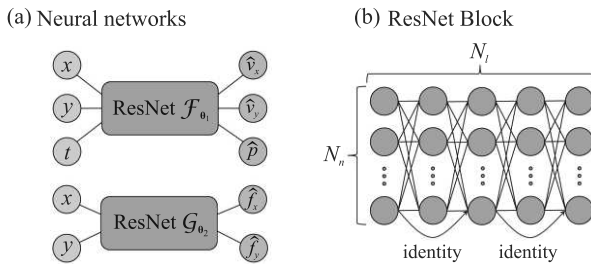


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Схемы нейронных сетей и (б) – используемая ResNet архитектура

Нейронные сети должны быть достаточно сложными, чтобы воспроизводить закономерности, характерные для рассматриваемого турбулентного течения. Теорема универсальной аппроксимации гаран-

тирует, что это возможно [23, 24]. В оригинальной работе [4] авторы использовали полносвязную архитектуру нейронной сети, однако здесь мы реализовали архитектуру типа ResNet [25] для обеих нейронных сетей, поскольку мы обнаружили, что она работает лучше в соответствии с результатами, представленными ранее [26]. Использованная нами архитектура представлена на рис. 2б. Параметры N_l и N_n обозначают количество скрытых слоев и нейронов в каждом скрытом слое соответственно. Выход $\mathbf{Y}_k$ слоя с номером k определяется выражением

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{2j+1} &= \sigma \left(\hat{W}_{2j+1} \mathbf{Y}_{2j} + \mathbf{b}_{2j+1} + \mathbf{Y}_{2j-1} \right), \quad j \geq 0, \\ \mathbf{Y}_{2j} &= \sigma \left(\hat{W}_{2j} \mathbf{Y}_{2j-1} + \mathbf{b}_{2j} \right), \quad j \geq 1, \\ \mathbf{Y}_{N_l+1} &= \hat{W}_{N_l+1} \mathbf{Y}_{N_l} + \mathbf{b}_{N_l+1}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\mathbf{Y}_{-1} \equiv \mathbf{0}$ для удобства обозначений, $\mathbf{Y}_0$ соответствует входному слою, $\mathbf{Y}_{N_l+1}$ обозначает выходной слой, $\hat{W}$ и $\mathbf{b}$ – это веса и смещения (обучаемые параметры сетей, которые образуют вектор θ), а σ – это нелинейная активационная функция, применяемая поэлементно. В качестве активационной функции мы используем гиперболический тангенс, поскольку такой выбор обеспечивает разумный компромисс между временем обучения и результирующей точностью [15].

В общем случае увеличение размера нейронной сети может уменьшить ошибку предсказаний, если ей предоставляется достаточно данных для обучения. Здесь мы фиксируем $N_l = 7$, $N_n = 250$ для $\mathcal{F}_{\theta_1}(\mathbf{r}, t)$ и $N_l = 5$, $N_n = 30$ для $\mathcal{G}_{\theta_2}(\mathbf{r})$. Отметим, что $\mathcal{G}_{\theta_2}(\mathbf{r})$ значительно проще, чем $\mathcal{F}_{\theta_1}(\mathbf{r}, t)$, поскольку она не зависит от времени и внешняя сила обычно не имеет сложной пространственной структуры.

Обучение нейронных сетей предполагает минимизацию функции потерь, состоящей из двух слагаемых. Первое слагаемое описывает отклонение между прогнозируемой и измеренной скоростью:

$$\mathcal{L}_{\text{data}} = \frac{1}{N_{\text{data}} U^2} \sum_{n=1}^{N_{\text{data}}} |\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}_n^d, t_n^d) - \mathbf{v}^d(\mathbf{r}_n^d, t_n^d)|^2, \quad (5)$$

где $U^2 = \sum_n \mathbf{v}_d^2(\mathbf{r}_n^d, t_n^d) / N_{\text{data}}$ – это основанная на измерениях оценка среднеквадратичной скорости потока. Второе слагаемое в функции потерь учитывает отклонение предсказаний от уравнения Навье–Стокса и условий несжимаемости:

$$\mathcal{L}_{\text{eq}} = \frac{1}{N_{\text{eq}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{eq}}} [e_1^2(\mathbf{r}_n^e, t_n^e) + e_2^2(\mathbf{r}_n^e, t_n^e) + e_3^2(\mathbf{r}_n^e)], \quad (6)$$

где $\{\mathbf{r}_n^e, t_n^e\}_{n=1}^{N_{\text{eq}}}$ – это точки коллокации, в которых анализируются отклонения и

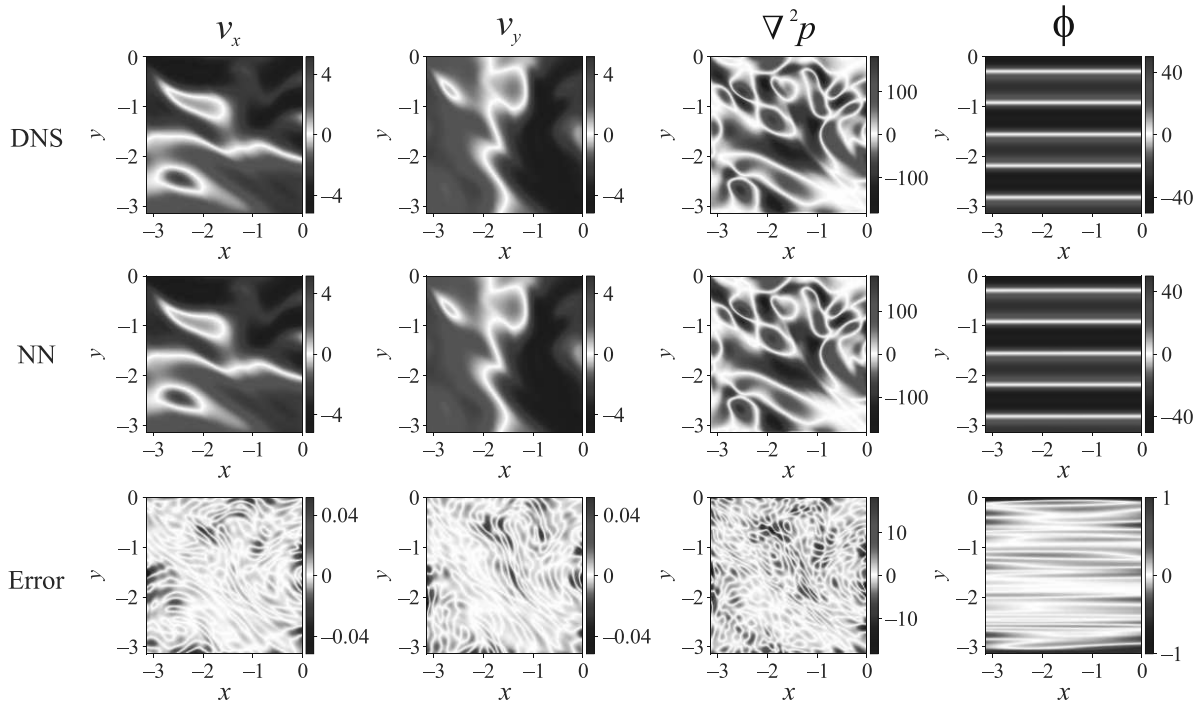


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сравнение данных DNS и предсказаний PINN для модели, обученной на незашумленных измерениях скорости. Количество точек данных и точек коллокации составляет $N_{\text{data}} = 3 \times 10^4$ и $N_{\text{eq}} = 9 \times 10^4$ соответственно

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \left(\partial_t \hat{\mathbf{v}} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{v}} + \nabla \hat{p} + e^{\lambda_1} \hat{\mathbf{v}} - e^{\lambda_2} \nabla^2 \hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{f}} \right) L/U^2, \\ e_2 &= (\partial_x \hat{v}_x + \partial_y \hat{v}_y) L/U, \\ e_3 &= \left(\partial_x \hat{f}_x + \partial_y \hat{f}_y \right) L^2/U^2. \end{aligned}$$

Вычисление правых частей подразумевает дифференцирование выходов нейронных сетей по входным параметрам с использованием автоматического дифференцирования [27]. Отметим, что число и расположение точек коллокации не ограничены измерениями и могут быть выбраны произвольно. Мы фиксируем $N_{\text{eq}} = 9 \times 10^4$, причем часть этих точек совпадает с точками измерений $\{\mathbf{r}_n^d, t_n^d\}_{n=1}^{N_{\text{data}}}$, а остальные генерируются случайным образом. Также отметим, что вместо выполнения условий несжимаемости, нейронные сети могут предсказывать функции тока [4, 28]. Однако в этом случае вычисление слагаемых в уравнении Навье–Стокса предполагает вычисление производных более высокого порядка, что значительно замедляет процесс обучения.

Полная функция потерь определяется выражением

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{data}} + \beta \mathcal{L}_{\text{eq}}, \quad (7)$$

где β – это коэффициент, уравнивающий оба слагаемых. Его значение можно адаптивно изменять в процессе обучения [29, 30], но мы используем более

простую стратегию, в которой этот параметр фиксирован. Эмпирически мы обнаружили, что $\beta = 0.02$ хорошо подходит для задач рассматриваемого типа.

Минимизация функции потерь (7) выполняется градиентным оптимизатором, который находит оптимальные параметры сети $\{\theta_1, \theta_2\}$ и параметры уравнений $\{\lambda_1, \lambda_2\}$. Сначала мы обучаем модель на протяжении 10^5 эпох с помощью оптимизатора Adam [31] со скоростью обучения $\mu = 10^{-3}$. Эпоха означает один полный проход по набору данных. В целях сокращения времени обучения мы реализовали метод смешанной точности [32]. Затем мы применяем оптимизатор L-BFGS-B [33], пока отличие функции потерь между итерациями не достигнет машинной точности. Обучение производится на графическом процессоре NVIDIA A100. Код написан с использованием PyTorch [34] и находится в открытом доступе [35].

5. Результаты. Для количественной оценки качества обученных моделей мы используем относительные среднеквадратичные ошибки (англ. RRMSE (Relative Root-Mean-Square Errors)), которые подразумевают усреднение по области наблюдений $\|\dots\|_2 = \sqrt{\frac{1}{L^2} \int d^2r |\dots|^2}$ и по времени $\langle \dots \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T dt \dots$

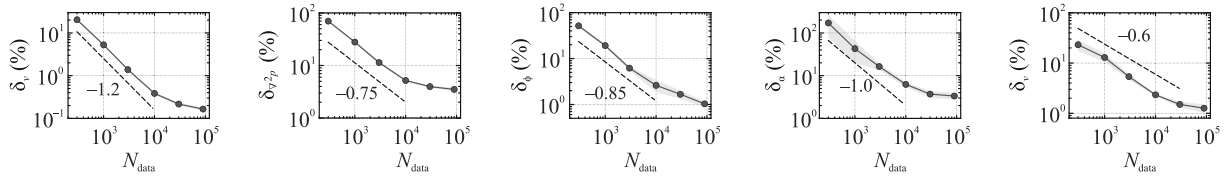


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость относительных среднеквадратичных ошибок реконструкций PINN от количества N_{data} данных, использованных для обучения. Пунктирные линии добавлены для сравнения и указаны их наклони. Закрашенные области соответствуют стандартным отклонениям, которые были оценены путем обучения пяти независимых моделей PINN для каждого значения N_{data}

$$\delta_Q = \left\langle \frac{\|\hat{Q} - Q\|_2}{\|Q\|_2} \right\rangle_T, \quad (8)$$

где $\hat{Q}$ обозначает интересующую нас физическую величину, предсказанную PINN, а Q – ее точное значение из DNS. Мы анализируем, насколько хорошо реконструируются скорость, давление, внешняя сила, коэффициент трения о дно и вязкость жидкости. Однако, как обсуждалось ранее в разделе 2, давление и внешняя сила не могут быть однозначно определены по измерениям поля скорости. Поэтому, чтобы определить точность реконструкции этих полей, мы анализируем ошибки в определении лапласиана давления $\nabla^2 p$ и ротора внешней силы $\phi = \partial_x f_y - \partial_y f_x$. Кроме того, чтобы протестировать статистические свойства предсказанного поля скорости, мы сравниваем энергетические спектры эталонного и реконструированного течений.

Влияние плотности исходных данных. Сначала мы обучили модели PINN на данных без шума. Мы зафиксировали число $N_{\text{eq}} = 9 \times 10^4$ точек для проверки уравнений и варьировали число N_{data} точек измерений в диапазоне от 3×10^2 до 9×10^4 для исследования зависимости точности предсказаний от плотности входных данных. Оказалось, что реконструкции, основанные на входных данных с $N_{\text{data}} \geq 10^4$, имеют высокую точность. На рис. 3 мы сравниваем данные DNS с предсказаниями нейронных сетей в зоне наблюдений в некоторый момент времени для модели PINN, обученной на $N_{\text{data}} = 3 \times 10^4$ измерениях скорости. Результаты оказываются очень близкими, а различия в основном локализованы на малых масштабах.

На рисунке 4 представлены RRMSE для поля скорости, лапласиана давления, ротора внешней силы, трения о дно и вязкости жидкости. По мере увеличения N_{data} ошибки сначала быстро уменьшаются по степенному закону ($N_{\text{data}} \leq 10^4$), а затем зависимости плавно выходят на насыщение ($N_{\text{data}} \geq 10^4$). Подобное поведение наблюдалось ранее для более простой задачи реконструкции двумерных затухающих

вихрей Тейлора [15]. Ошибка реконструкции поля скорости составляет менее 0.5% для $N_{\text{data}} \geq 10^4$, в то время как для других величин ошибки примерно на порядок больше. Такое поведение объясняется отсутствием измерений для этих величин, поэтому модель восстанавливает их исключительно из анализа физических уравнений.

На рисунке 5 мы сравниваем энергетические спектры течения с его реконструкцией PINN для анализа статистических свойств поля скорости. Поскольку область наблюдений не является периодической, при построении спектров мы использовали оконную функцию Ханна. По этой причине спектр DNS несколько отличается от представленного ранее на рис. 2b. Энергетические спектры поля скорости хорошо воспроизводятся для $N_{\text{data}} \geq 10^3$. Заметные отличия наблюдаются только для более разреженных данных, и они в основном локализованы на малых масштабах с $k \gg k_f$.

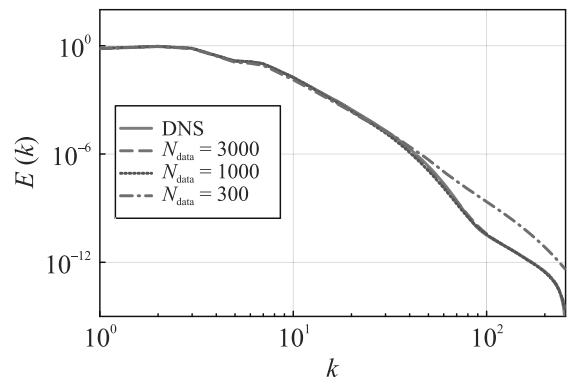


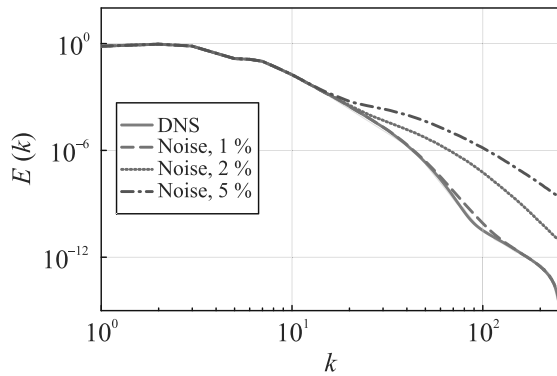
Рис. 5. (Цветной онлайн) Энергетические спектры для данных DNS и моделей PINN, обученных с различным количеством N_{data} точек измерений

Влияние измерительного шума. Теперь мы фиксируем $N_{\text{data}} = 3 \times 10^4$ и повторяем обучение, но модели получают на вход зашумленные измерения скорости. В таблице 1 приведены зависимости средних значений и стандартных отклонений ошибок предсказаний от уровня шума, полученные усреднением

Таблица 1. Зависимость средних значений и стандартных отклонений ошибок предсказаний PINN от уровня шума ε

ε	$\delta_v, \%$	$\delta_{\nabla^2 p}, \%$	$\delta_\phi, \%$	$\delta_\alpha, \%$	$\delta_\nu, \%$	$\delta_{p-\langle p \rangle_T}, \%$
0	0.22 ± 0.01	4.0 ± 0.2	1.6 ± 0.3	3.9 ± 0.5	1.5 ± 0.1	0.58 ± 0.03
0.005	0.28 ± 0.01	4.7 ± 0.1	1.7 ± 0.4	3.1 ± 0.9	1.2 ± 0.2	0.86 ± 0.03
0.01	0.50 ± 0.03	10.1 ± 1.8	2.0 ± 0.4	2.2 ± 1.8	0.7 ± 0.5	1.7 ± 0.1
0.02	2.39 ± 0.06	157 ± 9	5.4 ± 0.8	41.4 ± 4.4	12.3 ± 0.9	7.7 ± 0.3
0.05	5.84 ± 0.28	478 ± 43	13.0 ± 2.7	188 ± 26	56.1 ± 2.0	17.3 ± 1.0

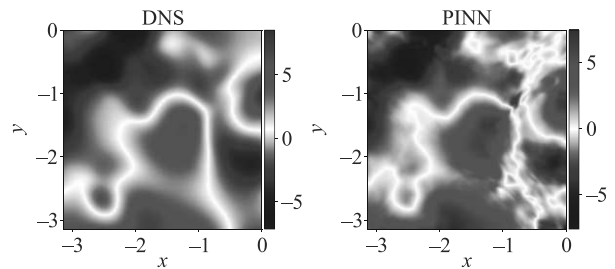
по десяти моделям PINN в каждом случае. Разработанный алгоритм оказывается устойчивым к малому шуму ($\varepsilon \leq 0.01$) во входных данных. Более того, ошибки для восстановленной скорости в этом случае меньше, чем уровень шума. Таким образом, алгоритм PINN способен корректировать небольшие ошибки измерений, основываясь на том, что поле скорости должно удовлетворять уравнению Навье–Стокса и условию несжимаемости.

**Рис. 6.** (Цветной онлайн) Энергетические спектры для данных DNS и моделей PINN, обученных с различным уровнем шума в исходных данных

По мере увеличения интенсивности шума ($\varepsilon \geq 0.02$) эффективность обученных моделей постепенно снижается. Поскольку для турбулентного потока диссипативные слагаемые вносят относительно небольшой вклад в уравнение Навье–Стокса, модель быстро теряет способность предсказывать коэффициент трения α и вязкость жидкости ν . В то же время точность определения поля скорости и внешней силы остается сопоставимой с уровнем шума.

Ошибки в предсказании лапласиана давления достигают огромных значений, но в первую очередь это связано с особенностями введенной метрики, а само давление реконструируется достаточно хорошо. Наличие шума в исходных данных приводит к мелкомасштабным ошибкам, которые усиливаются при вычислении пространственных производных второго порядка. Аналогичные рассуждения применимы и к ошибкам предсказания ротора внешней силы,

но в меньшей степени, поскольку в данном случае вычисляются только производные первого порядка. На рисунке 6 представлено сравнение энергетических спектров для эталонного и реконструированного течений, что подтверждает наличие мелкомасштабных ошибок в предсказанных полях скорости.

**Рис. 7.** (Цветной онлайн) Сравнение модифицированного давления $p - \langle p \rangle_T$ для данных DNS и модели PINN, обученной на входных данных с уровнем шума $\varepsilon = 0.05$

Для оценки точности реконструкции поля давления более прямым образом, мы вводим в рассмотрение модифицированное давление $p - \langle p \rangle_T$. Вычитание среднего по времени значения позволяет устранить неоднозначность в определении давления, связанную с произвольной гармонической функцией $h(\mathbf{r})$, см. подробности в разделе 2. Модифицированное давление определяется с точностью до произвольной константы, поэтому при сравнении этих полей мы также вычитаем из них средние по пространству значения. Полученные результаты показаны на рис. 7, где мы сравниваем модифицированные давления в некоторый момент времени для данных DNS и модели PINN, обученной на поле скорости с уровнем шума $\varepsilon = 0.05$. Несмотря на заметные различия, модифицированные давления в целом похожи друг на друга. Соответствующие RRMSE для всех уровней шума приведены в последнем столбце табл. 1, и они значительно меньше, чем ошибки в реконструкции лапласиана давления.

Заключение. Мы показали, что алгоритм PINN может объединять плотные во времени, пространственно разреженные и, возможно, зашумленные измерения скорости с точной физической моделью яв-

ления для извлечения дополнительной информации из обычных экспериментальных данных. Разработанная методика может быть применена поверх экспериментальных измерений методами PIV/PTV, потенциально расширяя их возможности. В частности, мы исследовали двумерное турбулентное течение жидкости, вызываемое внешней силой, и продемонстрировали, что предложенный подход позволяет восстанавливать пространственно плотные поля скорости и давления, определять внешнюю силу, а также неизвестные вязкость жидкости и коэффициент трения о дно. Способность восстанавливать полное состояние системы по ограниченным измерениям также может найти применение в задачах сжатия экспериментальных данных.

Предложенная методика основана на обучении физически-информированных нейронных сетей путем минимизации функции потерь, которая штрафует за отклонения от предоставленных данных и нарушения физических уравнений. Несмотря на наше стремление выбрать оптимальную архитектуру нейронных сетей и конфигурацию гиперпараметров, тщательное изучение этого вопроса выходит за рамки данной работы. Мы ожидаем, что внедрение более продвинутых архитектур [36–39] может привести к дальнейшему улучшению метода.

Реконструированные течения сравнивались с эталонным путем анализа относительных среднеквадратичных ошибок и энергетических спектров. В целом, результаты показывают хорошую точность для приложений сверхразрешения и определения неизвестных параметров системы, а также демонстрируют умеренную устойчивость к шуму во входных данных. При низком уровне шума алгоритм может исправлять ошибки в измерениях скорости на основе физических уравнений. Разработанная методика может быть полезна для анализа течений в случае, когда физическая модель явления хорошо построена.

Хотя в нашем исследовании использовались плотные во времени измерения скорости, следует отметить, что метод PINN может быть расширен и применен к редким во времени измерениям. В этом случае интервал между последовательными изображениями пассивных частиц достаточно велик, и методы PIV/PTV оказываются неэффективными для определения мгновенной скорости течения. Однако физическую модель явления можно дополнить уравнением, описывающим перенос пассивных частиц, и затем мы можем обучать PINN по экспериментальным изображениям их пространственного распределения. Примеры применения такой стратегии можно найти в работе [40], и вместо пассивных частиц можно так-

же следить за полем температуры [41, 42]. Для турбулентных систем расстояние между последовательными изображениями частиц не может превышать ляпуновское время, но насколько близко можно подойти к этому пределу – вопрос открытый.

Наконец, несмотря на то, что представленные результаты выглядят многообещающими, в данном исследовании не был рассмотрен ряд вопросов, важных для практических приложений:

- В большинстве случаев физическая модель описывает систему лишь приближенно. Например, для течений в тонких слоях жидкости уравнение (1) нарушается для мелкомасштабных мод, размер которых сравним с толщиной слоя. Насколько чувствителен алгоритм PINN к недостаткам физической модели?
- Рассматриваемый поток был пространственно однородным. Будет ли алгоритм работать также хорошо для существенно неоднородных систем? Какие изменения для этого потребуются?
- Процедура, использованная для моделирования измерений скорости, не учитывает всех особенностей экспериментальных измерений PIV/PTV. Было бы полезно исследовать возможности алгоритма, используя экспериментальные данные, собранные в различных условиях. Первые шаги в этом направлении уже сделаны в работах [15–17].
- Как увеличение степени нелинейности потока повлияет на качество предсказаний? Какой объем данных потребуются для достижения желаемой точности реконструкции? Можно ли подойти к проблеме теоретически и найти фундаментальные ограничения на требуемую пространственно-временную плотность исходных данных?

Мы надеемся, что будущие исследования позволят решить эти проблемы и что найденные решения будут способствовать дальнейшему развитию PINN.

Авторы благодарят Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау за предоставление вычислительных ресурсов.

Финансирование работы. Работа В. Парфеньева и И. Никитина выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FFWR-2024-0017 Института теоретической физики имени Л. Д. Ландау. В. Парфеньев также выражает

благодарность Фонду развития теоретической физики и математики “БАЗИС”, проект 22-1-3-24-1.

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

1. J. van der Kindere, A. Laskari, B. Ganapathisubramani, and R. De Kat, *Exp. Fluids* **60**, 1 (2019).
2. T. A. Zaki and M. Wang, *Phys. Rev. Fluids* **6**(10), 100501 (2021).
3. M. Asch, M. Bocquet, and M. Nodet, *Data assimilation: methods, algorithms, and applications*, SIAM, Philadelphia (2016).
4. M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, *J. Comput. Phys.* **378**, 686 (2019).
5. A. Arzani, J.-X. Wang, and R. M. D’Souza, *Phys. Fluids* **33**(7), 071905 (2021).
6. Y. Du, M. Wang, and T. A. Zaki, *International Journal of Heat and Fluid Flow* **99**, 109073 (2023).
7. S. Cai, Z. Mao, Z. Wang, M. Yin, and G. E. Karniadakis, *Acta Mechanica Sinica* **37**(12), 1727 (2021).
8. G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, *Nat. Rev. Phys.* **3**(6), 422 (2021).
9. P. Sharma, W. T. Chung, B. Akoush, and M. Ihme, *Energies*, **16**(5), 2343 (2023).
10. G. Boffetta, A. Cenedese, S. Espa, and S. Musacchio, *Europhysics Letters* **71**(4), 590 (2005).
11. H. Xia, M. Shats, and G. Falkovich, *Phys. Fluids* **21**(12), 125101 (2009).
12. A. V. Orlov, M. Y. Brazhnikov, and A. A. Levchenko, *JETP Lett.* **107**, 157 (2018).
13. L. Fang and N. T. Ouellette, *Phys. Rev. Fluids* **6**(10), 104605 (2021).
14. H. Eivazi, Y. Wang, and R. Vinuesa, *Measurement science and technology* **35**(7), 075303 (2024).
15. H. Wang, Y. Liu, and S. Wang, *Phys. Fluids* **34**(1), 017116 (2022).
16. P. Clark Di Leoni, K. Agarwal, T. A. Zaki, C. Meneveau, and J. Katz, *Exp. Fluids* **64**(5), 95 (2023).
17. S. Cai, C. Gray, and G. E. Karniadakis, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **73**, 1 (2024).
18. N. Constantinou, G. Wagner, L. Siegelman, B. Pearson, and A. Palóczy, *J. Open Source Softw.* **6**, 3053 (2021).
19. V. Parfenyev, *Phys. Rev. E* **106**(2), 025102 (2022).
20. I. Kolokolov, V. Lebedev, and V. Parfenyev, *Phys. Rev. E* **109**(3), 035103 (2024).
21. V. Parfenyev, *Phys. Fluids* **36**(1), 01514 (2024).
22. P. K. Mishra, J. Herault, S. Fauve, and M. K. Verma, *Phys. Rev. E* **91**(5), 053005 (2015).
23. G. Cybenko, *Math. Control Signals Syst.* **2**(4), 303 (1989).
24. K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White, *Neural Netw.* **2**(5), 359 (1989).
25. K. He, X. Zhang, S. Ren, and J. Sun, *Deep residual learning for image recognition*, in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, IEEE, Las Vegas, NV, USA (2016), p. 770.
26. C. Cheng and G.-T. Zhang, *Water* **13**(4), 423 (2021).
27. A. G. Baydin, B. A. Pearlmutter, A. A. Radul, and J. M. Siskind, *Phys. Fluids* **18**(153), 1 (2018).
28. V. Kag, K. Seshasayanan, and V. Gopinath, *Phys. Fluids* **34**(5), 055130 (2022).
29. S. Wang, Y. Teng, and P. Perdikaris, *SIAM J. Sci. Comput.* **43**(5), A3055 (2021).
30. X. Jin, S. Cai, H. Li, and G. E. Karniadakis, *J. Comput. Phys.* **426**, 109951 (2021).
31. D. P. Kingma and J. Ba, *arXiv preprint arXiv:1412.6980* (2014).
32. P. Micikevicius, Sh. Narang, J. Alben, G. Diamos, E. Elsen, D. Garcia, B. Ginsburg, M. Houston, O. Kuchaiev, G. Venkatesh, and H. Wu, *arXiv preprint arXiv:1710.03740*, 2017.
33. R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, and C. Zhu, *SIAM J. Sci. Comput.* **16**(5), 1190 (1995).
34. A. Paszke, S. Gross, F. Massa et al. (Collaboration), *Pytorch: An imperative style, highperformance deep learning library*, in *Advances in Neural Information Processing Systems*; H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d’Alche-Buc, E. Fox, and R. Garnett, Curran Associates, Inc. Red Hook, NY, USA (2019), v. 32.
35. <https://github.com/parfenyev/2d-turb-PINN/>.
36. L. Z. Zhao, X. Ding, and B. A. Prakash, *arXiv preprint arXiv:2307.11833* (2023).
37. S. Wang, B. Li, Y. Chen, and P. Perdikaris, *arXiv preprint arXiv:2402.00326*, 2024.
38. Z. Liu, Y. Wang, S. Vaidya, F. Ruehle, J. Halverson, M. Soljačić, T. Y. Hou, and M. Tegmark, *arXiv preprint arXiv:2404.19756*, 2024.
39. F. Buzaev, J. Gao, I. Chuprov, and E. Kazakov, *Mach. Learn.* **113**, 3675 (2023).
40. M. Raissi, A. Yazdani, and G. E. Karniadakis, *Science* **367**(6481), 1026 (2020).
41. S. Cai, Z. Wang, F. Fuest, Y. J. Jeon, C. Gray, and G. E. Karniadakis, *J. Fluid Mech.* **915**, A102 (2021).
42. P. Clark Di Leoni, L. Agasthya, M. Buzzicotti, and L. Biferale, *Eur. Phys. J. E* **46**(3), 16 (2023).

Критическая температура и параметр порядка в сверхпроводящих гетероструктурах с учетом ненулевой константы связи в полидоменном ферромагнетике

В. А. Туманов¹⁾, Ю. Н. Прошин

Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2024 г.

После переработки 10 сентября 2024 г.

Принята к публикации 19 сентября 2024 г.

Изучено сверхпроводящее состояние в гетероструктурах, содержащих слои сверхпроводника (S) и ферромагнетика (F), расщепленного на домены с учетом дальнегодействующего электрон-электронного взаимодействия в ферромагнитном слое. Вычислены критическая температура и пространственное распределение параметра порядка для различных гетероструктур. Рассчитаны различные варианты спиновых клапанов, в том числе клапан, основанный на уединенной возвратной сверхпроводимости в асимметричных F/S/F системах. В зависимости критической температуры S/F/S системы от толщины ферромагнитного слоя наблюдается смещение минимума из-за наличия доменной структуры. Получено состояние с чередующимися знаками фазы сверхпроводящего параметра порядка в одном из сверхпроводящих слоев на фоне доменных стенок. В F/S/F системах чередование знака фазы также возможно на краю одного из ферромагнитных слоев за счет чередования направления намагниченности. Обсуждается возможность использования чувствительности фазы параметра порядка к магнитным неоднородностям для создания управляемого джозефсоновского 0- π контакта.

DOI: 10.31857/S0370274X24100226, EDN: ORJBRK

1. Введение. Контакт сверхпроводника (S) с ферромагнитным металлом (F) привлекает внимание исследователей из-за возможности сосуществования ферромагнитного и сверхпроводящего упорядочения в пределах одного образца [1–4]. Большой интерес представляют разнообразные джозефсоновские контакты [4–8] и спиновые клапаны [9–15], сформированные из тонких слоев сверхпроводника (S) и ферромагнетика. В недавних исследованиях [5, 16–24] прослеживается большой интерес к системам, в которых сверхпроводимость сосуществует с неоднородными магнитными текстурами. Одним из наиболее распространенных типов неоднородностей в слоистых системах является структура доменов. В природных системах характерный размер магнитных неоднородностей велик по сравнению с сверхпроводящей длиной когерентности ξ_s . В искусственных системах можно достичь гораздо более мелких магнитных неоднородностей [25], в частности, доменов [26, 27], и влияние таких магнитных неоднородностей на критическую температуру становится значительным [2, 28–31]. В уединенном сверхпроводнике дальнедействующее притяжение коллективизированных электронов является основным механиз-

мом, приводящим к возникновению сверхпроводящего состояния ниже критической температуры T_c . Аналогичное притяжение в ферромагнитном металле, даже если присутствует, как правило, не приводит к возникновению сверхпроводимости, так как сосуществует с ферромагнитным взаимодействием. Образованию куперовских пар с противоположными спинами будет препятствовать более сильное ферромагнитное взаимодействие, выстраивающие спины электронов сонаправлено. В гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик притяжение электронов в ферромагнетике проявляет себя и может приводить к повышению критической температуры. В работах [32–34], стимулированных экспериментами на сверхрешетках La/Gd [35, 36], показано, что в специально приготовленных гетероструктурах этот эффект может быть очень значительным. Влияние положительной константы связи в ферромагнетике может проявиться, если ферромагнитное взаимодействие будет сильно подавлено. Одним из механизмов такого подавления может быть разворот направления намагниченности на масштабах сверхпроводящей длины когерентности. В таких системах теоретические расчеты прогнозируют возможность наблюдения уединенной возвратной сверхпроводимо-

¹⁾e-mail: tumanvadim@yandex.ru

сти — появление сверхпроводимости при увеличении толщины одного из прилегающих к сверхпроводнику ферромагнитных слоев [34].

Механизм влияния магнитных неоднородностей на сверхпроводимость и, в частности, на критическую температуру изучен во многих работах [2, 28–31]. При этом количественное описание такого влияния затруднено технической сложностью этой задачи и остается актуальным. Предложенный недавно численный подход [37, 38] значительно упрощает эту задачу. В рамках этого подхода в настоящей работе рассмотрены различные конфигурации намагниченности (включая доменную структуру) в S/F/S и F/S/F системах в рамках теории эффекта близости в грязном пределе. Проведена оценка влияния электрон-электронного взаимодействия в ферромагнитных слоях на критическую температуру и параметр порядка вблизи критической температуры для таких систем.

2. Модель. Мы рассматриваем слои сверхпроводника и ферромагнетика в грязном пределе: длина когерентности в сверхпроводнике и ферромагнетике $\xi_{s(f)}$ значительно больше соответствующих длин свободного пробега $l_{s(f)}$ [1, 2]. Такое соотношение параметров характерно для широкого круга экспериментальных систем, и это приближение хорошо зарекомендовало себя при описании эксперимента даже вне области применимости [1, 39]. В этом случае мы можем использовать уравнения Узаделя [1, 2] для описания сверхпроводимости в слоистой системе. Поле, создаваемое самим ферромагнитным слоем, также играет важную роль в определенных случаях [18, 19, 23]. В настоящей работе мы будем пренебрегать таким полем, поскольку для тонких ферромагнитных пленок оно относительно невелико, и в этом случае, по мнению большинства исследователей (см., например, работу [40] или обзоры [1–4]), критическая температура для хорошего контакта с металлом зависит главным образом от степени проникновения куперовских пар в металлический ферромагнетик. При температуре, близкой к критической, уравнения Узаделя для ферромагнитного слоя с произвольной намагниченностью можно записать в виде [3, 5]:

$$\frac{D_f}{2} \hat{\nabla}^2 \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) - |\omega| \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i}{2} \text{sgn} \omega \left\{ (\mathbf{I}, \hat{\sigma}), \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) \right\} = -\hat{\Delta}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где ω — частоты Мацубары, $\mathbf{I}$ — вектор эффективного обменного поля, $\hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega)$ — матричная функции Узаделя в F слое [3, 5], описывающая поведение син-

глетных и триплетных куперовских пар, D_f — коэффициент диффузии в ферромагнитном слое, $\hat{\sigma}$ — вектор, состоящий из матриц Паули, фигурные скобки обозначают антикоммутатор. Здесь и далее для простоты предполагается, что $k_B = \mu_B = \hbar = 1$, где k_B — постоянная Больцмана, μ_B — магнетон Бора. $\Delta(\mathbf{r})$ — сверхпроводящий параметр порядка. Здесь учтено, что константа электрон-электронного взаимодействия может быть отлична от нуля в ферромагнитном слое. В сверхпроводящем слое уравнения Узаделя имеют вид:

$$\frac{D_s}{2} \hat{\nabla}^2 \hat{F}_s(\mathbf{r}, \omega) - |\omega| \hat{F}_s(\mathbf{r}, \omega) = -\hat{\Delta}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\hat{F}_s(\mathbf{r}, \omega)$ и D_s — матричная функция Узаделя и коэффициент диффузии в сверхпроводящем слое соответственно. В этой статье мы рассмотрим случай без сверхпроводящего тока через систему. Граничные условия на внешних границах соответствуют отсутствию потока куперовских пар:

$$\frac{\partial \hat{F}_{s(f)}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

Для простоты мы здесь и далее ограничимся рассмотрением границ, расположенных перпендикулярно оси x (см. рис. 1). На внутренних границах S/F работают граничные условия Куприянова–Лукичева [1, 41]:

$$\begin{cases} \frac{4D_s}{\sigma_s v_s} \frac{\partial \hat{F}_s(\mathbf{r}, \omega)}{\partial x} = \frac{4D_f}{\sigma_f v_f} \frac{\partial \hat{F}_{f1}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial x} \\ \frac{4D_f}{\sigma_f v_f} \frac{\partial \hat{F}_{f1}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial x} = \hat{F}_s(\mathbf{r}, \omega) - \hat{F}_{f1}(\mathbf{r}, \omega), \end{cases} \quad (4)$$

где $\sigma_{s(f)}$ — параметры прозрачности со стороны сверхпроводника (ферромагнитного металла). Эти параметры связаны между собой соотношением $n_{sf} = (N_f v_f)/(N_s v_s)$, где $N_{s(f)}$ — плотность электронных состояний на уровне Ферми, $v_{s(f)}$ — скорость Ферми. Это соотношение следует из условия детального баланса $N_s \sigma_s v_s = N_f \sigma_f v_f$ [42]. Краевая задача дополнена уравнением самосогласования [1, 2]:

$$\Delta(\mathbf{r}) \ln \frac{T}{T_{cs(k)}} = \pi T \sum_{\omega > 0}^{\omega_{D(k)}} \text{Sp} \left(\hat{F}_{(k)}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\Delta(\mathbf{r})}{\omega} \right), \quad (5)$$

где T_{cs} — критическая температура объемного сверхпроводника, ω_D — дебаевская частота, индекс k нумерует слои. Для ферромагнитных слоев мы также будем иногда использовать параметр T_{cs} . В ферромагнетике он теряет первоначальный смысл. Параметр T_{cs} связан с константой электрон-электронного взаимодействия (см. далее выражение (8)) и означает критическую температуру сверхпроводящего пе-

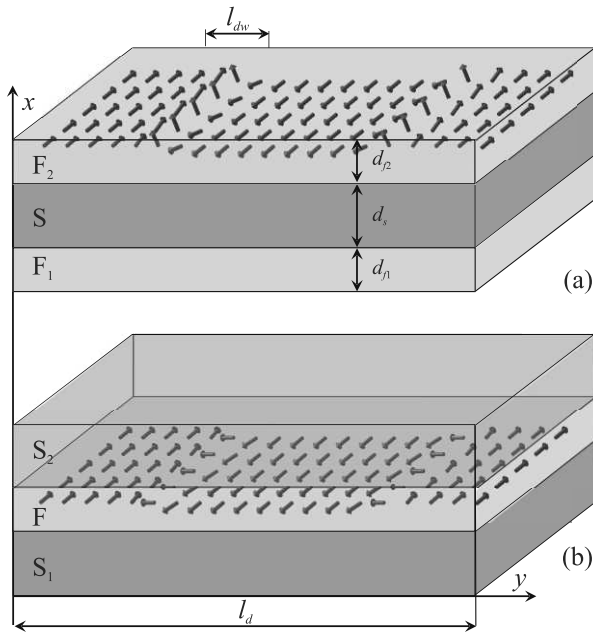


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическое изображение F/S/F (a) и S/F/S (b) систем, в которых один из ферромагнитных слоев разделен на полосовые домены стенками Блоха (a) или Нееля (b)

перехода для металла в рамках теории БКШ, если изъять из уравнений слагаемое, отвечающее за обменное взаимодействие.

3. Численный метод. Для решения описанной задачи мы будем использовать итерационную процедуру, в которой критическая температура и профиль параметра порядка уточняются на каждом шаге. Процедура подробно описана в наших предыдущих работах [37, 38]. Приведем здесь только ключевые идеи алгоритма. Стартуя с затравочных температуры и пространственного распределения параметра порядка, мы численно решаем описанную краевую задачу. Чтобы рассчитать параметр порядка в каждом слое с номером k на следующем шаге, мы используем итерационную формулу, основанную на уравнении самосогласования:

$$\Delta_{(n+1)}(\mathbf{r}) = \lambda_{(k)} \pi T_{(n)} \sum_{\omega > 0}^{\omega_{D(k)}} \text{Sp} \hat{F}_{(k)(n)}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6)$$

Сумма в правой части (6) немного модифицирована на верхней границе, чтобы достичь непрерывности по температуре:

$$\sum_{\omega > 0}^{\omega_D} f(\omega) \Rightarrow \sum_{\omega > 0}^{\omega_m} f(\omega) + \frac{\omega_D - \omega_m}{2\pi T} f(\omega_{m+1}), \quad (7)$$

где m такое, что $\omega_m \leq \omega_D < \omega_{m+1}$. Безразмерная

константа связи $\lambda_{(k)}$ связана с $T_{cs(k)}$ следующим образом:

$$\lambda_{(k)} = \left(2\pi T_{cs(k)} \sum_{\omega > 0}^{\omega_{D(k)}} \frac{1}{\omega} \right)^{-1}. \quad (8)$$

Заметим, что (6) не является уравнением самосогласования и совпадает с ним только после успешного нахождения самосогласованного решения. Далее мы вычисляем среднее значение модуля параметра порядка по всей системе и определяем величину $a = \langle |\Delta| \rangle / \langle |\Delta_0| \rangle$, которую мы используем в дальнейшем. Здесь $\langle |\Delta_0| \rangle$ обозначает среднее от параметра порядка на предыдущей итерации. Температура на каждой итерации также меняется:

$$T_{(n+1)} = T_{(n)} a^p (T_{cs}/T_{(n)}), \quad (9)$$

где параметр $p > 0$ динамически настраивается для достижения более быстрой и стабильной сходимости. В этой формуле используется наибольшее значение T_{cs} в системе. Когда параметры порядка на соседних итерациях совпадают с заданной точностью, краевая задача считается решенной. В противном случае параметр порядка нормируется на величину a и мы снова переходим к решению краевой задачи. Температуру, полученную в ходе работы алгоритма, можно считать критической температурой. Строго говоря, критической температурой была бы наивысшая температура, при которой обеспечивается самосогласованное решение. Однако в большинстве случаев алгоритм находит единственное решение с заданной точностью. Для бислоя S/F с однородными ферромагнитными слоями, результаты, полученные с использованием нашего подхода, согласуются с результатами, полученными с помощью метода фундаментального решения, описанного в работе [43].

4. F/S/F системы. Рассмотрим для начала F/S/F системы, содержащие однородные слои ферромагнетика (рис. 2). Для вычисления зависимостей на этой фазовой диаграмме и всех, приведенных ниже, использованы следующие общие параметры. Для ферромагнетика $\omega_D(F) = 460$ K, $2I\tau_f = 0.5$, где τ_f – время свободного пробега. Свойства сверхпроводника близки к свойствам ванадия в одной из серий образцов в эксперименте [39]: $\omega_D(S) = 390$ K, $T_{cs} = 5.4$ K, $\xi_s = 125$ Å, длина когерентности чистого сверхпроводника $\xi_{s0} = 443$ Å. Параметры всех внутренних границ одинаковы: $\sigma_s = 10$, $n_{sf} = 5$. Здесь и далее предполагается, что в ферромагнитном металле отсутствует магнитно-мертвый слой (*magnetic dead layer*), что характерно для сильных магнетиков с резкими границами. Так, например, в эксперименте [39] слои железа толщиной 1.5–2 Å понизили кри-

тическую температуру системы Fe/V/Fe почти в 2 раза. Характерная длина затухания $\xi_I = \sqrt{D_f/2I}$ и длина когерентности $\xi_f = \sqrt{D_f/2\pi T_{cs}}$ для ферромагнитного металла указаны в подписях к рис. 2–8. Полученные зависимости согласуются с результатами, полученными методом постоянного в пределах слоя параметра порядка в работах [44–46]: специальным подбором толщин можно добиться уединенной возвратной сверхпроводимости. Наличие дальнего действующего притяжения электронов в ферромагнитном слое расширяет диапазон параметров, при которых прогнозируется такое поведение критической температуры (см. штриховые кривые на рис. 2). В текущей работе мы рассмотрели случай достаточно сильного ферромагнетика, и наличие λ_f играет меньшую роль по сравнению с мягким ферромагнетиком, рассмотренным в [44, 45].

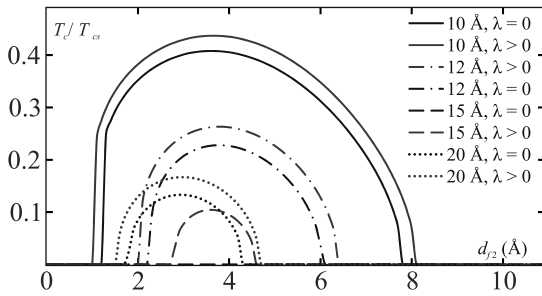


Рис. 2. (Цветной онлайн) Критическая температура структуры $F_1/S(105 \text{ Å})/F_2$ в зависимости от толщины d_{f2} слоя F_2 . Синие кривые соответствуют константе связи в ферромагнетике $\lambda_f = 0.204$, черные соответствуют случаю $\lambda_f = 0$. Сплошные кривые соответствуют толщине d_{f1} слоя F_1 , равной 10 Å , штрихпунктирные – $d_{f1} = 12 \text{ Å}$, штриховые – $d_{f1} = 15 \text{ Å}$, пунктирные – $d_{f1} = 20 \text{ Å}$. Параметры слоев: $I = 1000 \text{ K}$, $\xi_I = 8.2 \text{ Å}$, $\xi_f = 63 \text{ Å}$.

Рассмотрим далее F/S/F системы, в которых один или оба ферромагнитных слоя расщеплены на периодическую систему полосовых доменов с периодом l_d . Доменная граница описывается следующей зависимостью полярного угла от координаты [47]:

$$\theta = 2 \arctan \exp \left(\frac{y - y_0}{l_{dw}} \right), \quad (10)$$

где y_0 – положение доменной стенки, величину l_{dw} принято называть толщиной доменной стенки. Если азимутальный угол $\varphi = \frac{\pi}{2}$ – это доменная граница Нееля, при $\varphi = 0$ – доменная граница Блоха (см. рис. 1). Предполагается, что при наличии двух неоднородных ферромагнетиков тип стенок и параметры доменной структуры одинаковы. В таком случае, ес-

ли пренебречь магнитным полем, тип стенки не влияет на критическую температуру.

На рисунке 3 представлен пример распределения параметра порядка для системы F/S/F с двумя расщепленными на домены слоями. В данном случае направления намагниченностей в F слоях, разделенных сверхпроводником, инвертированы друг относительно друга. Как можно видеть на рис. 5 такая магнитная текстура отвечает наибольшей T_c . В данном примере выбран больший по сравнению с ξ_s размер домена и влияние доменной структуры не сглажено слишком сильно в плоскости границы [37]. На рисунке 3 можно видеть, что вблизи стенок плотность куперовских пар наибольшая. Это обусловлено ослаблением распаривающего действия ферромагнитных слоев за счет влияния магнитных неоднородностей. Механизм этого влияния достаточно сложен, так на магнитных неоднородностях формируется значительная плотность триплетных куперовских пар.

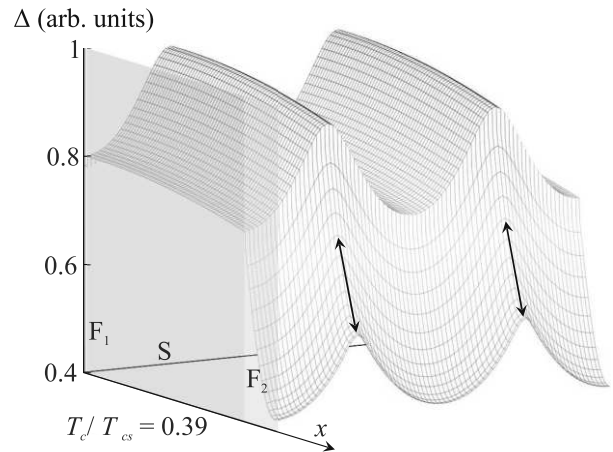


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение сверхпроводящего параметра порядка в системе $F_1(3.5 \text{ Å})/S(105 \text{ Å})/F_2(20 \text{ Å})$. Намагниченность полудоменных слоев, разделенных сверхпроводником, инвертирована. Параметры слоев и доменной структуры: $I = 500 \text{ K}$, $\xi_I = 16.3 \text{ Å}$, $\xi_f = 89 \text{ Å}$, $\lambda_f = 0.211$, $l_d = 5000 \text{ Å}$, $l_{dw}/l_d = 0.015$. На рисунке 3, 4, 6 и 8 стрелки показывают положение доменных стенок и размеры слоев показаны в масштабе только по оси x .

На рисунке 4 представлено распределение параметра порядка для F/S/F системы, в которой один из слоев однороден, а второй – расщеплен на домены. На рисунке 4 (и далее на рис. 6) намагниченность в центре домена параллельна или антипараллельна намагниченности второго ферромагнитного слоя. Слой F_1 выбран очень тонким, но на рис. 4 можно видеть,

что его намагниченность очень сильно влияет на параметр порядка. При таком подборе толщин влияние антиколлинейной намагниченности схоже с влиянием доменных стенок. Модуль параметра порядка почти постоянен в области антиколлинейной намагниченности и достигает максимума на краю стенок. Для F/S/F системы такого типа в нашей предыдущей работе [37] проводилось сравнение теории с экспериментом [27], в котором, по нашим оценкам, наблюдается сильное влияние мелких доменов на критическую температуру.

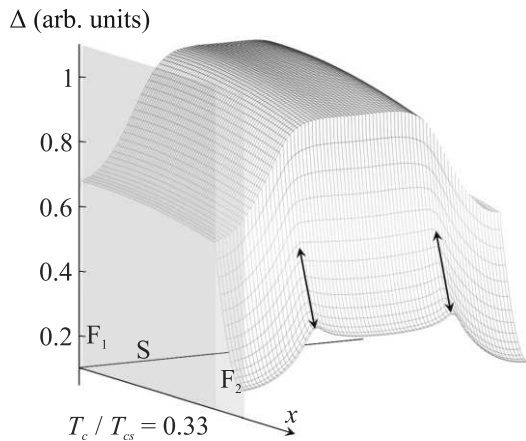


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение сверхпроводящего параметра порядка в системе $F_1(2 \text{ \AA})/S(125 \text{ \AA})/F_2(25 \text{ \AA})$. Слой F_2 расщеплен на домены. Параметры слоев и доменной структуры: $I = 500 \text{ K}$, $\xi_I = 16.3 \text{ \AA}$, $\xi_f = 89 \text{ \AA}$, $\lambda_f = 0.211$, $l_d = 3000 \text{ \AA}$, $l_{dw}/l_d = 0.015$

На рисунке 5 представлена зависимость критической температуры от периода доменной структуры для различных F/S/F структур. Для параллельной однородной намагниченности $T_c = 0$ для выбранных на рис. 5 толщин слоев. Кроме этого, подобно случаю штриховых кривых на рис. 2, при $\lambda_f = 0$ критическая температура также равна 0 для однородных антипараллельных слоев. При l_d порядка ξ_s влияние магнитных неоднородностей на критическую температуру доминирует, но при увеличении l_d взаимная ориентация разделенных сверхпроводником слоев оказывается более важной. Величина λ_f значительно влияет на критическую температуру даже в случае, когда воздействие обменного поля сильно подавлено мелкими доменами.

На рисунке 6 представлена та же система, что и на рис. 4, но однородный ферромагнитный слой F_1 толще и влияние антипараллельной ориентации начинает доминировать. На вставке рис. 6 можно видеть еще одну интересную особенность: на внешней границе неоднородного ферромагнитного слоя фаза

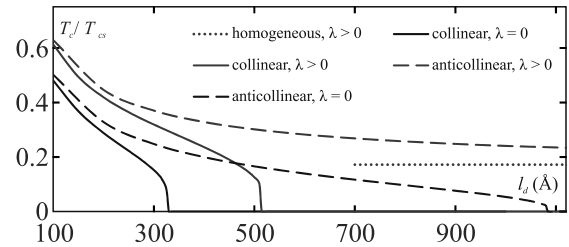


Рис. 5. (Цветной онлайн) Критическая температура структуры $F_1(8.5 \text{ \AA})/S(105 \text{ \AA})/F_2(40 \text{ \AA})$ в зависимости от периода доменной структуры l_d . Синие кривые соответствуют константе связи в ферромагнетике $\lambda_f = 0.204$, черные – соответствуют случаю $\lambda_f = 0$. Сплошной линией показан случай, когда оба слоя расщеплены на идентичные домены, штриховая – домены, разделенные сверхпроводником, ориентированы антипараллельно. Пунктирной линией показана критическая температура для монодоменной антипараллельной ориентации намагниченностей. Параметры слоев: $I = 200 \text{ K}$, $\xi_I = 20.4 \text{ \AA}$, $\xi_f = 70 \text{ \AA}$, $l_{dw}/l_d = 0.025$

параметра порядка меняется на π при параллельной ориентации намагниченностей тела домена и однородного слоя F_1 . Распределение сверхпроводящего параметра порядка такого типа образуют так называемые структуры доменов сверхпроводящей фазы [48]. Такая особенность качественно объясняется подкручиванием фазы парной амплитуды в ферромагнитном слое. В областях с антипараллельной ориентацией подкручивание слегка подавлено за счет влияния слоя F_1 . В области локализации доменных стенок можно видеть небольшие максимумы параметра порядка, так как магнитные неоднородности также замедляют изменение фазы парной амплитуды в слое F_2 .

5. S/F/S системы. Рассмотрим далее S/F/S системы с ферромагнитным слоем, расщепленным на домены. На рисунке 7 представлена зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода S/F/S системы в зависимости от толщины ферромагнитного слоя для различных значений λ_f , характеризующих интенсивность электрон-электронных корреляций в ферромагнетике, и периодов доменной структуры. Магнитные неоднородности повышают критическую температуру и изменяют глубину и положение минимума на представленной зависимости. Дальнейшее притяжение электронов в ферромагнетике достаточно равномерно повышает критическую температуру при любых толщинах барьерного слоя.

Чередующаяся фаза параметра порядка возможна при наличии неоднородного ферромагнитного слоя. На рисунке 8 показана S/F/S система, ферро-

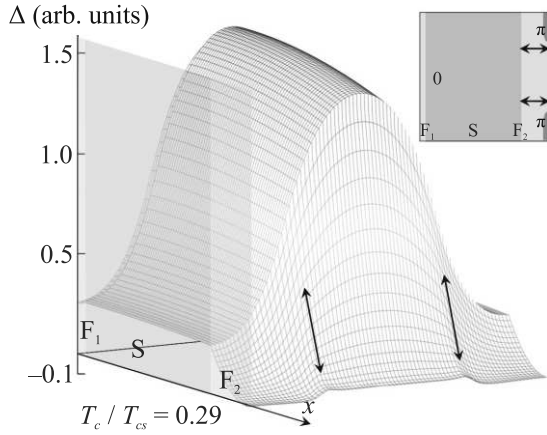


Рис. 6. (Цветной онлайн) Распределение сверхпроводящего параметра порядка в системе $F_1(6 \text{ \AA})/S(105 \text{ \AA})/F_2(37 \text{ \AA})$. Слой F_2 разделен на домены. На вставке показано распределение фазы параметра порядка в плоскости xy в этой системе. Параметры слоев: $I = 500 \text{ K}$, $\xi_I = 16.3 \text{ \AA}$, $\xi_f = 89 \text{ \AA}$, $\lambda_f = 0.211$, $l_d = 5000 \text{ \AA}$, $l_{dw}/l_d = 0.015$

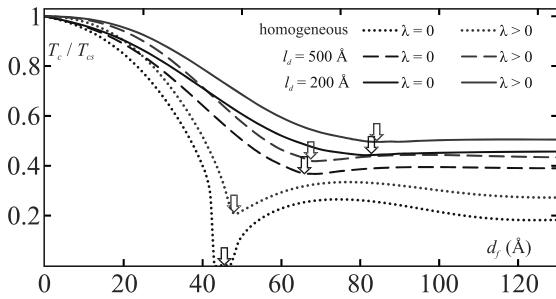


Рис. 7. (Цветной онлайн) Критическая температура структуры $S_1(110 \text{ \AA})/F/S_2(100 \text{ \AA})$ в зависимости от толщины монодоменного и полидоменного слоя d_f . Синие кривые соответствуют константе связи в ферромагнетике $\lambda_f = 0.225$, черные соответствуют случаю $\lambda_f = 0$. Сплошные кривые соответствуют периоду доменной структуры $l_d = 200 \text{ \AA}$, штриховые – $l_d = 500 \text{ \AA}$, пунктирные – монодоменному F слою. Стрелки указывают позиции 0- π переходов. Параметры слоев: $I = 200 \text{ K}$, $\xi_I = 20.4 \text{ \AA}$, $\xi_f = 70 \text{ \AA}$, $l_{dw}/l_d = 0.025$

магнитный слой в которой расщеплен на периодическую систему полосовых доменов. Толщина ферромагнитного слоя подобрана таким образом, что разность фаз параметра порядка меняется в плоскости границы. Разность фаз оказывается равной 0 в области локализации доменных стенок и равна π в центре домена. Максимальный модуль параметра порядка на свободной границе слоя S_2 по нашим оценкам не превышает 10% от среднего модуля параметра порядка в слое S_1 (около 5% на рис. 8). Учитывая результаты, показанные на рис. 7, механизм такого по-

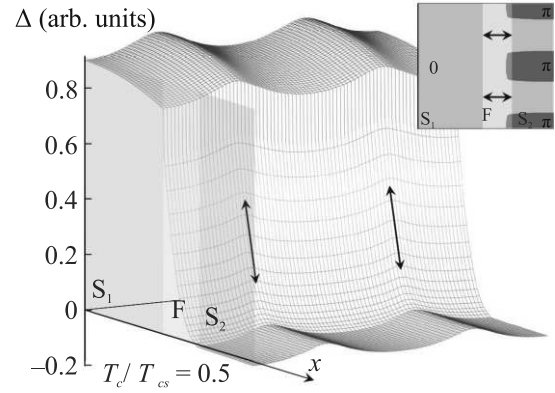


Рис. 8. (Цветной онлайн) Распределение сверхпроводящего параметра порядка в системе $S_1(140 \text{ \AA})/F(57 \text{ \AA})/S_2(100 \text{ \AA})$. На вставке показано распределение фазы параметра порядка в плоскости xy в этой системе. Параметры слоев: $I = 200 \text{ K}$, $\xi_I = 20.4 \text{ \AA}$, $\xi_f = 70 \text{ \AA}$, $\lambda_f = 0.179$, $l_d = 5000 \text{ \AA}$, $l_{dw}/l_d = 0.015$

ведения можно понять: положение первого минимума $T_c(d_f)$ (при его наличии) приблизительно соответствует смене знака действительной части диагональных компонент матричной функции Узаделя внутри ферромагнитного слоя. Магнитные неоднородности влияют на интенсивность распаривания куперовских пар в ферромагнетике, и значение толщины d_f , соответствующей 0- π переходу, растет. Для доменов, размер которых порядка длины когерентности, параметр порядка сильно сглажен в плоскости границы [37], что препятствует наблюдению доменов сверхпроводящей фазы. Нижняя оценка размера магнитного домена, при котором возможно наблюдение чередования фазы, примерно $5\xi_s$. С другой стороны, когда толщина стенки превышает ξ_s на порядок, ее влияние становится слишком слабым и эффект также пропадает. Таким образом, для S/F/S и F/S/F систем грубая нижняя оценка размера домена сверхпроводящей фазы порядка ξ_s , а максимальный размер 0-доменов в S/F/S системах превышает ξ_s примерно на порядок. Точно подобрав толщину ферромагнитного слоя, можно использовать такую систему в качестве управляемого джозефсоновского 0- π контакта [49], добавив небольшие сверхпроводящие контакты, отделенные от системы немагнитным барьером. Контакты могут быть размещены как на S слоях, разделенных ферромагнетиком, так и на более тонком слое S_2 . Манипулируя положением доменной стенки, можно добиться разности фаз между контактами либо 0, либо π . Динамика доменных стенок и методы манипуляции их положением под воздействием внешнего поля или тока подробно изучены теоретически [50, 51] и экспериментально [52]. В работе

[48] был предложен специальный дизайн джозефсоновской структуры, позволяющий надежно наблюдать домены сверхпроводящей фазы. В этой работе рассматривалась S-F/N-sIS система, где роль доменной стенки играла область нормального металла, а роль тела домена выполняла однородная ферромагнитная область. В ней также были подробно рассмотрены способы управления состояниями системы и перспективы ее применения в элементах памяти. Похожим образом может использоваться и F/S/F система, рассмотренная в предыдущем разделе (см. рис. 6), если разместить маленький сверхпроводящий контакт на поверхности полидоменного ферромагнитного слоя F_2 . В данном случае управление разностью фаз может осуществляться либо смещением доменной структуры, либо разворотом намагниченности монодоменного слоя F_1 .

6. Заключение. В работе теоретически изучено влияние периодической доменной структуры на критическую температуру F/S/F и S/F/S систем. Рассмотрено совместное воздействие взаимной ориентации намагниченности и ее градиента. Исследован случай ненулевой константы электрон-электронного взаимодействия в F-слоях таких систем. Изучено возникновение уединенной возвратной сверхпроводимости в асимметричных F/S/F системах с однородной и неоднородной намагниченностью. Полученные результаты применимы также к периодическим сверхрешеткам с чередующимися S и F слоями. Найдены интересные особенности распределения сверхпроводящего параметра порядка по образцу. Отметим смену знака фазы параметра порядка в F/S/F и S/F/S системах, а также связанное с этим эффектом смещение минимума в зависимости $T_c(d_f)$ для полидоменного ферромагнитного слоя. В частности, предложенная геометрия S/F/S системы представляет собой набор π контактов в плоскости границы и чередующихся 0 и π контактов перпендикулярно границе. Рассмотренные F/S/F и S/F/S системы могут быть использованы в качестве управляемых 0- π джозефсоновских контактов.

Финансирование работы. Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

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

1. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Прошин, М. Г. Хусаинов, УФН **172**, 113 (2002).
2. A. I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. **77**, 935 (2005).

3. F. S. Bergeret, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, Rev. Mod. Phys. **77**, 1321 (2005).
4. K. B. Efetov, I. A. Garifullin, A. F. Volkov, and K. Westerholt, Springer Tracts Mod. Phys. **227**, 251 (2008).
5. Ya. V. Fominov, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, Phys. Rev. B **75**, 104509 (2007).
6. B. Crouzy, S. Tollis, and D. A. Ivanov, Phys. Rev. B **76**, 134502 (2007).
7. О. Н. Борисова, В. А. Туманов, Ю. Н. Прошин, ФММ **121**, 482 (2020).
8. А. А. Максимовская, В. И. Ружицкий, Н. В. Кленов, С. В. Бакурский, М. Ю. Куприянов, И. И. Соловьев, Письма в ЖЭТФ **115**, 786 (2022).
9. S. Oh, D. Youm, and M. Beasley, Appl. Phys. Lett. **71**, 2376 (1997).
10. L. R. Tagirov, Phys. Rev. Lett. **83**, 2058 (1999).
11. A. I. Buzdin, A. V. Vedyayev, and N. V. Ryzhanova, Europhys. Lett. **48**, 686 (1999).
12. Yu. N. Proshin, A. Zimin, N. G. Fazleev, and M. G. Khusainov, Phys. Rev. B. **73**, 184514 (2006).
13. М. В. Авдеев, Ю. Н. Прошин, ЖЭТФ **144**, 1251 (2013).
14. Р. Р. Гайфуллин, В. Н. Кушнир, Р. Г. Деминов, Л. Р. Тагиров, М. Ю. Куприянов, А. А. Голубов, ФТТ **61**, 1585 (2019).
15. А. А. Камашев, Н. Н. Гарифьянов, А. А. Валидов, В. Е. Катаев, А. С. Осин, Я. В. Фоминов, И. А. Гарифуллин, Письма в ЖЭТФ **119**, 296 (2024).
16. M. Houzet and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B **74**, 214507 (2006).
17. D. S. Rabinovich, I. V. Bobkova, and A. M. Bobkov, Phys. Rev. B **98**, 184511 (2018).
18. V. L. Vadimov, M. V. Sapozhnikov, and A. S. Mel'nikov, App. Phys. Lett. **113**, 032402 (2018).
19. J. Baumard, J. Cayssol, F. S. Bergeret, and A. Buzdin, Phys. Rev. B **99**, 014511 (2019).
20. B. Krunavakarn, Phys. Lett. A **383**, 1341 (2019).
21. С. В. Миронов, А. В. Самохвалов, А. И. Буздин, А. С. Мельников, Письма в ЖЭТФ **113**, 102 (2021).
22. A. P. Petrović, M. Raju, X. Y. Tee, A. Louat, I. Maggio-Aprile, R. M. Menezes, M. J. Wyszzyński, N. K. Duong, M. Reznikov, C. Renner, and M. V. Milošević, Phys. Rev. Lett. **126**, 117205 (2021).
23. E. S. Andriyakhina and I. S. Burmistrov, Phys. Rev. B **103**, 174519 (2021).
24. Е. С. Андрияхина, С. Апостолофф, И. С. Бурмистров, Письма в ЖЭТФ **116**, 801 (2022).
25. A. O. Leonov, T. L. Monchesky, N. Romming, A. Kubetzka, A. N. Bogdanov, and R. Wiesendanger, New J. Phys. **18**, 065003 (2016).
26. J. Unguris, R. J. Celotta, and D. T. Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991).

27. В. А. Туманов, Ю. В. Горюнов, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **107**, 449 (2018).
28. T. Champel and M. Eschrig, Phys. Rev. B **71** 220506 (2005).
29. V. A. Tumanov and Y. N. Proshin, J. Low Temp. Phys. **185**, 460 (2016).
30. N. G. Pugach, M. Safonchik, T. Champel, M. E. Zhitomirsky, E. Lähderanta, M. Eschrig, and C. Lacroix, Appl. Phys. Lett. **111**, 162601 (2017).
31. В. А. Туманов, В. Е. Зайцева, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **116**, 443 (2022).
32. М. Г. Хусаинов, М. М. Хусаинов, Н. М. Иванов, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **89**, 730 (2009).
33. М. Г. Хусаинов, М. М. Хусаинов, Н. М. Иванов, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **90**, 134 (2009).
34. М. Г. Хусаинов, М. М. Хусаинов, Н. М. Иванов, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **90**, 402 (2009).
35. P. P. Deen, J. P. Goff, R. C. C. Ward, M. R. Wells, and A. Stunault, JMMM **240**, 553 (2002).
36. P. P. Deen, J. P. Goff, R. C. C. Ward, M. R. Wells, S. Langridge, R. Dalgliesh, S. Foster, and G. J. McIntyre, J. Phys. Condens. Matter **17**, 3305 (2005).
37. V. A. Tumanov and Yu. N. Proshin, Phys. Met. Metallogr. **125**, 237 (2024).
38. V. A. Tumanov and Yu. N. Proshin, Magnetic Resonance in Solids. **26**, 24111 (2024).
39. I. A. Garifullin, D. A. Tikhonov, N. N. Garif'yanov, L. Lazar, Yu. V. Goryunov, S. Ya. Khlebnikov, L. R. Tagirov, K. Westerholt, and H. Zabel, Phys. Rev. B **66**, 020505-R (2002).
40. F. S. Bergeret, K. B. Efetov, and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **62**, 11872 (2000).
41. М. Куприянов, В. Лукичев, ЖЭТФ **94**, 139 (1988).
42. М. Г. Хусаинов, Письма в ЖЭТФ **53**, 554 (1991).
43. Ya. V. Fominov, N. M. Chtchelkatchev, and A. A. Golubov, Phys. Rev. B **66**, 014507 (2002).
44. Yu. Proshin, M. Avdeev, M. Khusainov, and M. Khusainov, JMMM **324**, 3478 (2012).
45. Yu. N. Proshin and M. V. Avdeev, JMMM **383**, 166 (2015).
46. М. В. Авдеев, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **102**, 106 (2015).
47. A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*, Springer, Heidelberg (2008).
48. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, App. Phys. Lett. **108**, 042602 (2016).
49. E. C. Gingrich B. M. Niedzielski, J. A. Glick, Y. Wang, D. L. Miller, R. Loloee, W. P. Pratt Jr, and N. O. Birge, Nat. Phys. **12**, 564 (2016).
50. J. Shibata, G. Tatara, and H. Kohno, J. Phys. D: Appl. Phys. D **44**, 384004 (2011).
51. Е. Г. Галкина, К. Заспел, Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин, Л. М. Лерман, Письма в ЖЭТФ **110**, 474 (2019).
52. L. J. McGilly, P. Yudin, L. Feigl, A. K. Tagantsev, and N. Setter, Nat. Nanotechnol. **10**, 145 (2015).

Влияние анизотропии на исследование критического поведения спиновых моделей методами машинного обучения

Д. Д. Суховерхова, Л. Н. Щур¹⁾

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

Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 сентября 2024 г.

После переработки 16 сентября 2024 г.

Принята к публикации 18 сентября 2024 г.

В статье мы применили глубокую нейронную сеть для изучения вопроса переносимости знания между моделями статистической механики. Был проведен следующий компьютерный эксперимент. Сверточная нейронная сеть была обучена для решения задачи бинарной классификации моментальных снимков расположения спинов модели Изинга на двумерной решетке. При тестировании на вход нейронной сети подавались моментальные снимки расположения спинов модели Изинга на решетке с диагональными ферромагнитными и антиферромагнитными связями. По выходам тестируемой сети были получены оценки вероятности принадлежности образцов к парамагнитной фазе. Анализ этих вероятностей позволил оценить критическую температуру и критический показатель корреляционной длины. Выяснилось, что при слабой анизотропии нейронная сеть удовлетворительно предсказывает точку перехода и значение показателя корреляционной длины. Сильная анизотропия приводит к заметному отклонению предсказанных величин от точно известных. Качественно сильная анизотропия связана с наличием осцилляций корреляционной функции выше температуры возникновения беспорядка по Стефенсону и дальнейшим приближением к точке полностью фрустрированного случая.

DOI: 10.31857/S0370274X24100239, EDN: VVMLUH

1. Введение. Машинное обучение начинает формировать в последнее десятилетие дополнительный подход в физических науках в дополнение к традиционным подходам – эксперименту, теории и компьютерному моделированию [1]. Представляется целесообразным исследование этого нового подхода с точки зрения применимости к тем или иным проблемам и явлениям. Также необходима разработка методики оценки интересующих величин с необходимой точностью. В одной из первых работ по применению машинного обучения к исследованию фазовых переходов второго рода была предложена методика обучения с учителем [2] и получены удовлетворительные оценки критической температуры модельных систем. Этот подход был дополнен систематическим методом оценки критического показателя корреляционной длины [3]. Подход основан на бинарной классификации с применением глубокой нейронной сети.

Мы поднимаем вопрос об универсальности применения обученной сети. Обучение нейронной сети достаточно затратный процесс как по формированию набора данных для обучения, так и по затра-

там компьютерного времени и компьютерных мощностей. Преимущество нейронные сети имеют при использовании уже обученной сети, которая применяется, например, для высокоскоростной фильтрации данных с Большого адронного коллайдера [4]. Целесообразно изучить универсальность применения нейронной сети для извлечения информации о фазовом переходе второго рода. Один из первых шагов в этом направлении – это исследование применимости нейронной сети, обученной на стандартной модели статистической механики, двумерной модели Изинга, для исследований других моделей. Для простоты постановки тестирование проводилось на модели из того же класса универсальности, но с диагональной анизотропией, которая, как известно, нетривиально влияет на исследуемые свойства [5, 6].

Глубокая нейронная сеть (deep neural network, DNN) [7] – это многослойная сеть, первый слой которой представляет собой матрицу $L \times L$. Слои могут быть полносвязными или сверточными, каждая связь между слоями имеет вес [1], который в процессе обучения изменяется. Особенностью DNN является механизм обратного распространения ошибки, который позволяет эффективно обучать сеть [8] за счет изменения весов. В настоящей работе мы использу-

¹⁾e-mail: lev@landau.ac.ru

ем сверточную нейронную сеть (convolutional neural network, CNN). Читатель может найти детали в [3].

При *обучении* на вход нейронной сети подается распределение спинов на решетке $L \times L$ и указывается принадлежность каждого моментального снимка к ферромагнитной или парамагнитной фазе относительно известной температуры фазового перехода. При *тестировании* обученная сеть получает на вход моментальный снимок спинов решетки $L \times L$ при известной температуре T . На выходе одного нейрона сеть выдает $p_i \in [0, 1]$ как оценку принадлежности тестируемого образца парамагнитной фазе. Другой нейрон выдает принадлежность ферромагнитной фазе $f_i \equiv 1 - p_i$. Поэтому в дальнейшем мы будем анализировать только принадлежность парамагнитной фазе. Повторив тестирование N раз при заданных температуре образцов T и размере решетки L , мы получаем оценку $P(T; L)$ вероятности того, что N образцов, полученных при моделировании при температуре T , принадлежат парамагнитной фазе. Расчет этой функции производится по формуле (4). Из набора функций $P(T; L)$ будет определяться температура фазового перехода с помощью конечномерного анализа, как было предложено в работе [2]. Кроме того, мы исследуем вторые моменты распределения вероятностей принадлежности парамагнитной фазе $D(T; L)$, формула (5). Исследование ширины и полуширины гауссовой функции, приближающей распределение $D(T; L)$, позволяет оценить критический показатель корреляционной длины [3].

2. Исследуемые модели. Гамильтониан обобщенной модели Изинга имеет вид (рис. 1):

$$\mathcal{H} = - \sum_{x,y=1}^L \sigma_{x,y} [J_h \sigma_{x+1,y} + J_v \sigma_{x,y+1} + J_d \sigma_{x+1,y+1}]. \quad (1)$$

Температура фазового перехода этой модели известна из аналитического решения [9]:

$$\begin{aligned} \sinh \frac{2J_v}{k_B T_c} \sinh \frac{2J_h}{k_B T_c} + \sinh \frac{2J_h}{k_B T_c} \sinh \frac{2J_d}{k_B T_c} + \\ + \sinh \frac{2J_d}{k_B T_c} \sinh \frac{2J_v}{k_B T_c} = 1, \\ J_v + J_h > 0, \quad J_h + J_d > 0, \quad J_d + J_v > 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Обучение будем проводить на изотропной модели при значении параметров $J_d = 0$, $J_h = J_v = 1$. Тестирование будем проводить для случая диагональной анизотропии с набором параметров $J_h = J_v = J$, $J_d \neq 0$. При этом константа J_d может быть как положительной, так и отрицательной, ограниченной неравенством $J_d + J > 0$.

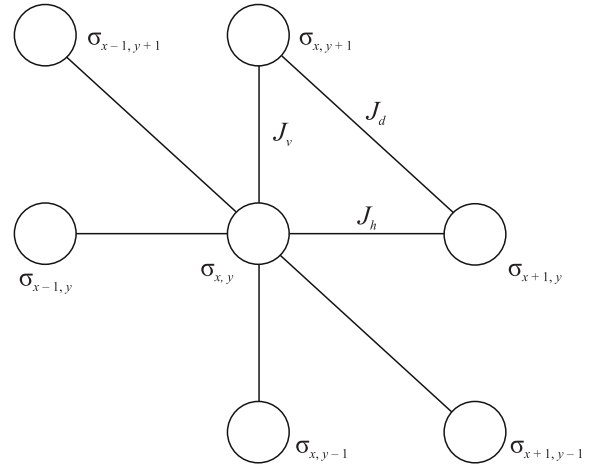


Рис. 1. Часть решетки с узлом $\sigma_{x,y}$ и его окружением в обобщенной модели Изинга

При заданном наборе значений температуры алгоритмом Метрополиса генерируется выборка из N некоррелированных конфигураций спинов. Время термализации составляет $20 \times L^{2.15}$ по оценке [10], и конфигурации сохраняются (*моментальный снимок!*) раз в $2 \times L^{2.15}$ шагов Монте-Карло, измеряемых в числе L^2 локальных переворотов спинов решетки $L \times L$.

3. Обучение нейронной сети. Мы использовали сверточную архитектуру нейронной сети (CNN) с одним сверточным, двумя полносвязными слоями и ReLU-активацией между ними [3]. Сеть обучалась на некоррелированных снимках, полученных при моделировании изотропной модели Изинга, $J_d = 0$, $J_h = J_v = 1$, с линейными размерами решеток $L = 20, 30, 60, 80, 100, 120$. При каждом размере L мы выбирали 100 значений температуры с шагом 0.006 из диапазона температур:

$$T \in [T_c - 0.3, T_c + 0.3], \quad (3)$$

где критическая температура определялась по соотношению (2). Число моментальных снимков при обучении при каждой температуре T и каждом размере L было выбрано $M = 2048$.

Сеть обучалась для каждого линейного размера решетки L одну эпоху во избежание переобучения сети. При количестве эпох больше 20 переобучение ведет к практически однозначной классификации на ферромагнитную и парамагнитную фазы с достаточно точной оценкой температуры перехода, но при этом полностью теряется информация о свойствах корреляционной длины [11].

4. Тестирование. Тестирование проводилось по $N = 512$ моментальным снимкам, полученным при

моделировании для заданных констант связи, при каждом значении T и L , при этом значения L те же, что и при обучении. Значения температуры при тестировании выбирались также из диапазона (3) относительно критической температуры, рассчитанной по формуле (2). Такой выбор естественным образом включает интересующий интервал температур в окрестности фазового перехода тестируемой модели.

Как отмечалось во введении, каждый из N тестируемых образцов получает оценку p_i принадлежности парамагнитной фазе. Для каждого значения температуры и для каждого линейного размера решетки мы рассчитываем оценку вероятности принадлежности образца парамагнитной фазе

$$P(T; L) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i(T; L) \quad (4)$$

и соответствующие стандартные отклонения

$$D(T; L) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (p_i(T; L))^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i(T; L) \right)^2}. \quad (5)$$

5. Оценка критической температуры. В работе [2] был предложен метод оценки критической температуры на основе анализа $P(T; L)$ на основании гипотезы о соответствии псевдокритической температуры T_c^* значению оценки вероятности $P(T_c^*; L) = 0.5$. На рисунке 2 приведен результат вычисления набора функций $P(T; L)$ с антиферромагнитным взаимодействием по диагонали $J_d < 0$ при значении параметра анизотропии $J_d/J = -0.5$. Соответствующие функции $D(T; L)$ представлены на рис. 3.

Мы использовали следующие усредненные оценки вероятностей $P(T; L)$ для получения оценки критической температуры:

1. Температура, при которой прогноз сети наиболее близок к 0.5:

$$T_c^*(L) = \min_T |P(T; L) - 0.5|. \quad (6)$$

2. Температура, соответствующая точке пересечения прямой, соединяющей два ближайших к 0.5 прогноза сети, с $y=0.5$:

$$\begin{aligned} T_{\min} &= \min_T |P(T; L) - 0.5|, \quad P(T; L) < 0.5, \\ T_{\max} &= \min_T |P(T; L) - 0.5|, \quad P(T; L) > 0.5, \\ P_{\min} &= P(T_{\min}; L); \quad P_{\max} = P(T_{\max}; L), \\ T_c^{\circ}(L) &= \frac{T_{\min}(P_{\max} - 0.5) + T_{\max}(0.5 - P_{\min})}{P_{\max} - P_{\min}} \end{aligned} \quad (7)$$

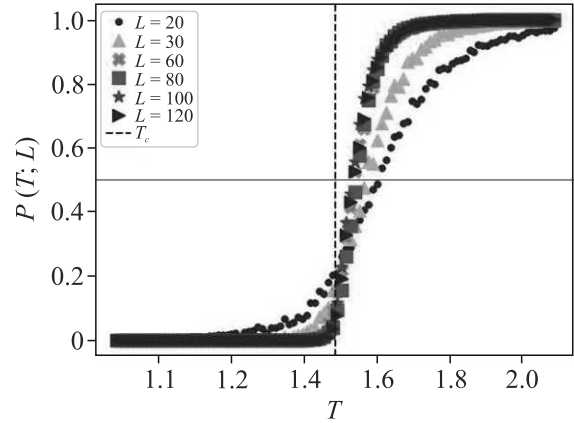


Рис. 2. (Цветной онлайн) Оценка принадлежности парамагнитной фазе $P(T; L)$ (4) модели Изинга с диагональной анизотропией при значении параметра анизотропии $J_d/J = -0.5$

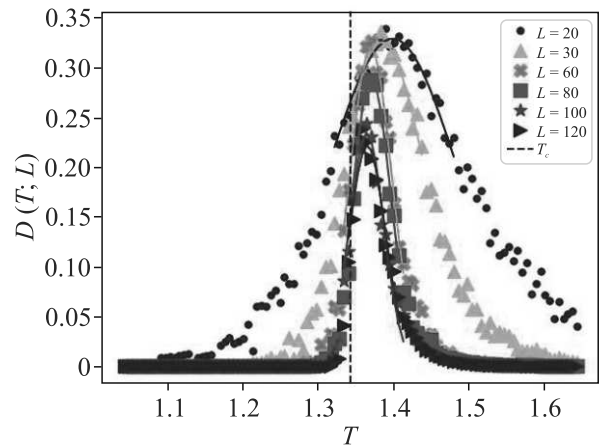


Рис. 3. (Цветной онлайн) Функция стандартных отклонений принадлежности парамагнитной фазе $D(T; L)$ модели Изинга с диагональной анизотропией, $J_d/J = -0.5$

3. Температура на основе функции $D(T; L)$: распределение $D(T; L)$ при каждом L приближается гауссовой функцией со средним μ и стандартным отклонением σ . Значение $\mu(L)$ рассматриваем как оценку критической температуры.

Для каждого набора мы рассчитали асимптотическое значение оценки критической температуры, используя известное выражение для конечномерного сдвига псевдокритической температуры [12, 13]. Например, для оценки по варианту 1, это можно записать как

$$T_c^* = T_c^*(L) + a/L. \quad (8)$$

Отклонение полученной линейной аппроксимации точек $T_c^*(L)$ относительно точной критической температуры представлено на рис. 4 черными квадратами вместе со статистической ошибкой. Аналогично рассчитываются оценки критической температуры для остальных двух случаев. Заметим, что все три способа оценки критической температуры дают статистически эквивалентные результаты. Отклонение оценки критической температуры от точно известного значения обсуждается в разделе 7 статьи.

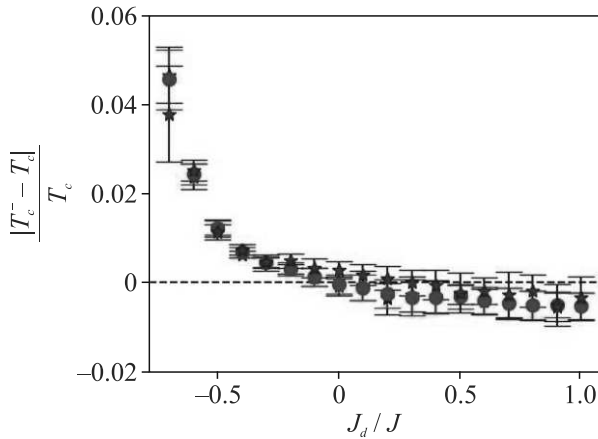


Рис. 4. (Цветной онлайн) Относительная ошибка оценки критической температуры T_c^- в пределе бесконечного размера решетки как функция параметра анизотропии J_d/J . Символы соответствуют трем способам оценки псевдокритической температуры, указанным в тексте: черные квадраты — T_c^- ; зеленые круги — T_c^* ; синие звезды — μ . J_d/J

6. Оценка критического показателя корреляционной длины. Корреляционная длина ξ в модели Изинга (1) в области фазового перехода растет по степенному закону $\xi \propto \tau^{-1/\nu}$ при уменьшении приведенной температуры $\tau = (T - T_c)/T_c$. Критический показатель ν равен единице [14].

При фиксированном L каждую функцию $D(T; L)$ мы приближаем гауссианом, отбрасывая статистически незначимые значения на краях температурного диапазона, и анализируем полученные значения $\mu(L)$ так, как было указано в пункте 3 предыдущего раздела для оценки критической температуры, а также ширину $\sigma(L)$. Здесь мы используем гипотезу [3], о том, что ширина $\sigma(L)$ масштабируется так же, как и некоторые термодинамические функции [12, 13], с показателем корреляционной длины ν :

$$\sigma(L) \propto \frac{b}{L^{1/\nu}}. \quad (9)$$

Эта гипотеза была подтверждена в статье [3] для моделей в двух классах универсальности, в которой

были получены достоверные оценки показателя корреляционной длины для двумерной модели Изинга на квадратной решетке и модели Бакстера–Ву, формулируемой на треугольной решетке.

Результаты оценки критического показателя корреляционной длины изображены на рис. 5, построенном по данным в табл. 1.

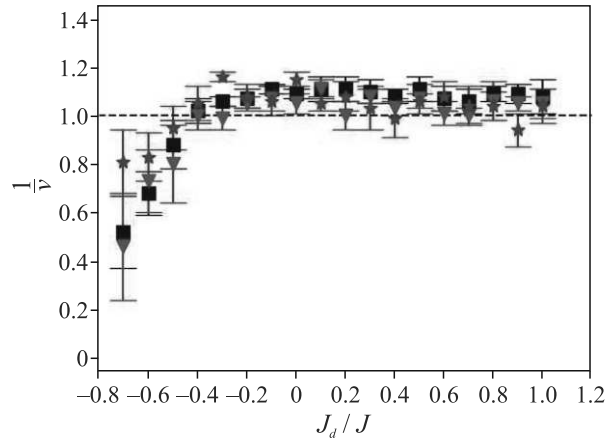


Рис. 5. (Цветной онлайн) Оценка обратного значения критического показателя корреляционной длины ν : черные квадраты — оценка по полной ширине, красные треугольники по правой части, зеленые звезды — по левой части

Таблица 1. Оценки обратного значения критического показателя корреляционной длины ν , полученные из анализа ширины $\sigma(L)$ функции $D(T; L)$ — второй столбец, правой полуширины $\sigma_r(L)$ этой функции — третий столбец и левой полуширины $\sigma_l(L)$ этой функции — четвертый столбец

J_d/J	$\frac{1}{\nu}$	$(\frac{1}{\nu})_r$	$(\frac{1}{\nu})_l$
-0.7	0.52(15)	0.46(22)	0.81(13)
-0.6	0.68(9)	0.73(13)	0.83(10)
-0.5	0.88(10)	0.80(16)	0.95(9)
-0.4	1.02(5)	1.00(6)	1.05(7)
-0.3	1.06(2)	0.99(5)	1.16(2)
-0.2	1.07(4)	1.05(3)	1.08(5)
-0.1	1.11(2)	1.07(5)	1.06(6)
0.0	1.09(2)	1.05(4)	1.15(3)
0.1	1.11(5)	1.11(4)	1.05(3)
0.2	1.11(5)	1.00(6)	1.08(6)
0.3	1.10(5)	1.08(3)	1.03(9)
0.4	1.08(3)	1.03(3)	0.99(8)
0.5	1.11(5)	1.07(6)	1.06(3)
0.6	1.07(5)	1.01(5)	1.08(6)
0.7	1.06(5)	1.00(3)	1.04(8)
0.8	1.09(3)	1.06(8)	1.04(6)
0.9	1.09(4)	1.05(3)	0.94(7)
1.0	1.08(7)	1.05(6)	1.04(7)

7. Обсуждение результатов. Мы использовали сверточную нейронную сеть для решения задачи бинарной классификации *изотропной* модели Изинга. По анализу предсказаний нейронной сети мы определили температуру фазового перехода T_c и показателя корреляционной длины ν с хорошим совпадением [2, 3] с точным аналитическим результатом [14].

Обученную сеть мы использовали для тестирования модели Изинга с *диагональной анизотропией* с ферромагнитными и антиферромагнитными связями. В области умеренных значений показателя анизотропии обученная на изотропной модели сеть предсказывает температуру фазового перехода и значение показателя корреляционной длины в пределах статистической погрешности, что можно видеть из табл. 1 и рис. 4 и 5 при значениях параметра анизотропии J_d/J от ферромагнитной анизотропии при $J_d/J = 1$ до антиферромагнитной анизотропии при $J_d/J = -0.4$.

При значениях параметра анизотропии $J_d/J < -0.4$ наблюдается систематическое отклонение как температуры перехода, так и показателя корреляционной длины от точных значений. Это отклонение можно объяснить особенностью фазовой диаграммы модели, исследованной Стефенсоном [15] и наличием в тестируемом температурном интервале моментальных снимков распределения спинов, попадающих выше температуры, которая в статье [15] была названа disorder temperature T_D , выше которой имеется область с осциллирующими парными корреляциями спинов. Осцилляции обусловлены конкурирующим диагональным антиферромагнитным взаимодействием. Поскольку такие осцилляции полностью отсутствовали при обучении нейронной сети, то результаты тестирования приводят к отклонению оценок критической температуры и показателя корреляционной длины.

Заметим, что диагональная анизотропия нетривиальным образом влияет также на наблюдаемые термодинамические величины. Например, было предсказано аналитически [16] и обнаружено численно [17], что величина кумулянта Биндера, построенная из отношения квадрата второго момента намагниченности к четвертому моменту намагниченности, изменяется в зависимости от параметра диагональной анизотропии. Ранее считалось, что его значение в точке фазового перехода определяется исключительно классом универсальности модели. Вариация кумулянта Биндера при положительных значениях параметра анизотропии невелика и составляет менее процента, как показано на рис. 4

из статьи [18]. При этом можно увидеть резкое падение при значении параметра анизотропии -0.4 , аналогично нашим данным по перекрестному обучению/тестированию.

Таким образом, мы установили качественно границы применимости перекрестного обучения при тестировании нейронной сетью модели с диагональной анизотропией и антиферромагнитным взаимодействием. Эти границы связаны с особенностями фазовой диаграммы анизотропной модели [15] и близостью к точке перехода системы в полностью фрустрированное состояние при $J_d/J = -1$, вблизи которого существуют долгоживущие топологические возбуждения, изученные в работах [19, 20].

Финансирование работы. Работа поддержана грантом 22-11-00259 Российского научного фонда.

Для проведения компьютерного моделирования и машинного обучения использован суперкомпьютерный комплекс Национального исследовательского университета “Высшая школа экономики”.

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

1. G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045002 (2019).
2. J. Carrasquilla and R.G. Melko, *Nat. Phys.* **13**, 431 (2017).
3. V. Chertentkov, E. Burovski, and L. Shchur, *Phys. Rev. E* **108**, L031102 (2023).
4. D. Derkach, M. Hushchyn, T. Likhomanenko, A. Rogozhnikov, N. Kazeev, V. Chekalina, R. Neychev, S. Kirillov, F. Ratnikov, and on behalf of the LHCb collaboration, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1085**, 042038 (2018).
5. V. Dohm and S. Wessel, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 060601 (2021).
6. V. Dohm, *Phys. Rev. E* **108**, 044149 (2023).
7. R. Kumari and S.K. Srivastava, *International Journal of Computer Applications* **160**, 11 (2017).
8. D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, and R.J. Williams, *Nature* **323**(6088), 533 (1986).
9. R. M. F. Houtappel, *Physica* **16**, 425 (1950).
10. V. Chertentkov and L. Shchur, *J. Phys. Conf. Ser.* **740**, 012003 (2021).
11. В. И. Чертенков, кандидатская диссертация, НИУ ВШЭ (2024).
12. M. E. Fisher and A. E. Ferdinand, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 169 (1967).
13. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **185**, 832 (1969).
14. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1941).

15. J. Stephenson, Phys. Rev. B **1**, 4405 (1970).
16. X.S. Chen and V. Dohm, Phys. Rev. E **70**, 056136 (2005).
17. W. Selke and L.N. Shchur, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, L739 (2005).
18. W. Selke and L.N. Shchur, Phys. Rev. E **80**, 042104 (2009).
19. S.E. Korshunov, Phys. Rev. B **72**, 144417 (2005).
20. A. Smerald, S. Korshunov, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **116**, 197201 (2016).

Lyapunov exponents in fundamental models of nonlinear resonance

I. I. Shevchenko¹⁾

Saint Petersburg State University, 199034 St. Petersburg, Russia

Institute of Applied Astronomy, Russian Academy of Sciences, 191187 St. Petersburg, Russia

Submitted 5 August 2024

Resubmitted 5 August 2024

Accepted 16 September 2024

The problem of analytical estimation of the Lyapunov exponents and Lyapunov timescales of the motion in multiplets of interacting nonlinear resonances is considered. To this end, we elaborate a unified framework, based on the separatrix map theory, which incorporates both an earlier approach for the first fundamental model of perturbed resonance (given by the perturbed pendulum Hamiltonian) and a new one for its second fundamental model (given by the perturbed Andoyer Hamiltonian). Within this framework, new accurate estimates for the Lyapunov timescales of the inner and outer subsystems of the Solar planetary system are presented and discussed.

DOI: 10.31857/S0370274X24100249, EDN: WHMFYK

Estimations of the Lyapunov exponents provide insights in most fundamental properties of dynamical systems [1–3]. We consider the problem of analytical estimation of the Lyapunov exponents and Lyapunov timescales of the motion in multiplets of interacting nonlinear resonances.

To describe the interaction of resonances in multiplets, we take two fundamental models of the perturbed nonlinear resonance (the guiding one in the multiplet): the first one is the perturbed pendulum model (introduced in [1] as a “universal” one), and the second one is the perturbed Andoyer model (introduced in [4] to describe resonances in orbital dynamics).

We elaborate a unified framework, based on the separatrix map theory, which incorporates both an earlier approach [5–7] for the first fundamental model and a new one for the second fundamental model. We assume that the resonances in the multiplet have comparable strengths. This choice is inspired by the fact that, in realistic applications, the perturbations are usually not at all weak (otherwise the chaotic component of phase space can be simply unimportant); see examples in [5, 8].

Within the given framework, we perform new accurate estimates for the Lyapunov timescales of the inner and outer subsystems of the Solar planetary system, and discuss their conformity with earlier analytical and numerical-experimental estimates.

In particular, we show that the low-dimensional model of [9] provides adequate estimates of the Lyapunov time for the inner Solar system, which conforms

with the known massive numerical-experimental estimates in full problem settings.

For the outer Solar system, the presented theory, as applied within the model elaborated in [10] for the 3J-5S-U7 three-body mean-motion resonance, also provides adequate analytical values of the Lyapunov time, in agreement with known numerical-experimental estimates.

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 author of this work declares that he has no conflicts of interest.

1. B. V. Chirikov, *Phys. Rep.* **52**, 263 (1979).
2. A. J. Lichtenberg and M. A. Leiberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, Springer, N.Y. (1992).
3. J. D. Meiss, *Rev. Modern Phys.* **64**, 795 (1992).
4. J. Henrard and A. Lemaître, *Celest. Mech.* **30**, 197 (1983).
5. I. I. Shevchenko, *Dynamical Chaos in Planetary Systems*, Springer Nature, Cham (2020).
6. I. I. Shevchenko, *Cosmic Res.* **40**, 296 (2002).
7. I. I. Shevchenko, *Phys. Lett. A* **378**, 34 (2014).
8. I. I. Shevchenko, *On the Lyapunov exponents of the asteroidal motion subject to resonances and encounters*, ed. by A. Milani, G. B. Valsecchi, and D. Vokrouhlický, *Near Earth Objects, our Celestial Neighbors: Opportunity and Risk (Proceedings IAU Symposium 236)*, Cambridge University Press, Cambridge (2007), p. 15.
9. K. Batygin, A. Morbidelli, and M. J. Holman, *Astrophys. J.* **799**, 120 (2015).
10. N. Murray and M. Holman, *Science* **283**, 1877 (1999).

¹⁾e-mail: i.shevchenko@spbu.ru

Поправка

В статье Сидельников М.С. и др., “Прямое наблюдение пиннинга вихрей Абрикосова в пространственно неоднородном кристалле $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ ” (Письма в ЖЭТФ 119(7), 518 (2024)) – неверно указан номер гранта в разделе “Финансирование работы”.

Верно: Рост кристаллов выполнен в рамках гранта Российского научного фонда #23-12-00307 с использованием оборудования Центра коллективного пользования Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук.

Содержание

Том 120, выпуск 7

Астрофизика и космология

Вергелес С.Н. Альтернативная идея об источнике барионной асимметрии во Вселенной	481
--	-----

Оптика, лазерная физика

Назаров М.М., Семенов Т.А., Таусенев А.А., Чащин М.В., Щеглов П.А., Лазарев А.В., Сидоров-Бирюков Д.А., Митрофанов А.В., Гордиенко В.М., Панченко В.Я. Ускорение электронов при воздействии тераваттного фемтосекундного лазерного излучения на кластеры азота	490
--	-----

Юдин В.И., Басалаев М.Ю., Раднатаров Д.А., Громов И.В., Радченко М.Д., Кобцев С.М., Тайченачев А.В. Рамсеевская спектроскопия резонансов КПН на D_1 линии атомов щелочных металлов в миниатюрных ячейках в поле встречных волн с противоположными круговыми поляризациями	498
---	-----

Молотков С.Н., Суцев И.С. О эквивалентности фазовых и поляризационных преобразований в квантовой оптике	505
---	-----

Плазма, гидро- и газодинамика

Паркевич Е.В. Особенности структуры искровых каналов в прикатодной зоне	511
---	-----

Конденсированное состояние

Боев М.В., Ковалев В.М. Фотовольтаический эффект Холла в двумерных флуктуирующих сверхпроводниках	516
---	-----

Вальков В.В., Злотников А.О., Гамов А., Федорова Н.А., Томилин Ф.Н. Квантовые эффекты при спин-флип переходе в топологическом антиферромагнитном изоляторе $MnBi_2Te_4$	521
---	-----

Бельская Н.А., Казак Н.В., Васильев А.Д., Еремин Е.В., Мошкина Е.М., Великанов Д.А., Безматерных Л.Н. , Гаврилкин С.Ю., Овчиников С.Г. Структурное разнообразие и фазовые переходы в боратах со смешанной валентностью $Mg_{2-x}Mn_{1+x}VO_5$ ($0.0 < x \leq 0.4$)	530
--	-----

Федосеев А.Д., Шустин М.С., Дзедзисашвили Д.М. Связанные состояния магнитных скирмионов высокого порядка и сверхпроводящего вихря Пирла	539
---	-----

Skornyakov S.L., Trifonov I.O., Anisimov V.I. Coulomb correlations and the electronic structure of bulk V_2Te_2O	547
--	-----

Методы физических исследований

Хохлов В.А., Ромашевский С.А., Ашитков С.И., Иногамов Н.А. Синхронное детектирование нелинейных явлений в оптоакустических осцилляциях нанопленки, инициированных фемтосекундным лазерным импульсом	550
---	-----

Ростом А.М., Томилин В.А., Ильичёв Л.В. Геометрическая фаза как основа квантовой акселерометрии	560
---	-----

Содержание

Том 120, выпуск 8

Поля, частицы, ядра

Рубцова О.А., Померанцев В.Н. Универсальные импульсные распределения и короткодействующие корреляции нуклонов	571
---	-----

Артамонов А.В., Бычков В.Н., Донсков С.В., Филин А.П., Филиппов С.Н., Горин А.М., Гушин Е.Н., Инякин А.В., Кекелидзе Г.Д., Хаустов Г.В., Холоденко С.А., Худяков А.А., Колосов В.Н., Коноплянников А.К., Кравцов В.И., Куденко Ю.Г., Кулик А.В., Куршецов В.Ф., Лишин В.А., Лысан В.М., Медынский М.В., Образцов В.Ф., Охотников А.В., Поляков В.А., Поляруш А.Ю., Романовский В.И., Рыкалин В.И., Садовский А.С., Самойленко В.Д., Шапкин М.М., Тюрин И.С., Уваров В.А., Ющенко О.П., Залиханов Б.Ж. Ограничение на относительную вероятность распада $K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0 e^+ \nu$	578
--	-----

Оптика, лазерная физика

Сазонов С.В. Генерация второй гармоники, сопровождаемая формированием высокоинтенсивных световых пульс	583
--	-----

Болдырев К.Н., Мостовщикова Е.В., Титов А.Н., Покровский В.Я., Горлова И.Г. Спектры пропускания инфракрасного излучения в TiS_3 : край фундаментального поглощения, фононы и экситоны	590
--	-----

Богачев В.А., Колоколов И.В., Лебедев В.В., Стариков Ф.А. Матрица корреляций градиентов фазы световой волны как способ измерения основных параметров турбулентности	598
---	-----

Ашитков С.И., Комаров П.С., Овчинников А.В., Ромашевский С.А., Струлева Е.В., Чефонов О.В., Агранат М.Б. Неравновесный нагрев электронов, плавление и модификация напыленки никеля ультракоротким импульсом терагерцового излучения	605
---	-----

Попов М.Ю., Хоробрых Ф.С., Климин С.А., Овсянников Д.А. Особенности резонансного комбинационного рассеяния света в ультратвердом аморфном углероде	615
--	-----

Макаров Г.Н., Петин А.Н. Наблюдение резонансной радиационно-столкновительной передачи колебательной энергии в молекулах при лазерном ИК многофотонном возбуждении в двухкомпонентной среде	620
--	-----

Плазма, гидро- и газодинамика

Парфеньев В., Блуменау М., Никитин И. Реконструкция двумерных турбулентных течений и их параметров с помощью физически-информированных нейронных сетей	627
--	-----

Конденсированное состояние

Туманов В.А., Прошин Ю.Н. Критическая температура и параметр порядка в сверхпроводящих гетероструктурах с учетом ненулевой константы связи в полидоменном ферромагнетике	636
--	-----

Методы физических исследований

Суховерхова Д.Д., Щур Л.Н. Влияние анизотропии на исследование критического поведения спиновых моделей методом машинного обучения	644
---	-----

Нелинейные явления

Shevchenko I.I. Lyapunov exponents in fundamental models of nonlinear resonance	650
---	-----

Сидельников М.С., Пальниченко А.В., Перваков К.С., Власенко В.А., Зверькова И.И., Успенская Л.С., Пудалов В.М., Винников Л.Я. Поправка	651
--	-----

