

ISSN 0370-274X

Том 117, Выпуск 11–12

Июнь 2023



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



2023 г. Том 117 вып. 11, стр. 801 – 882

2023 г. Том 117 вып. 12, стр. 883 – 960

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 117

Выпуск 11

10 июня 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Измерение T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности реакции некогерентного фоторождения π^- -мезона на дейтроне

В. В. Гаушштейн^{a,1)}, Б. И. Василишин^a, Э. Дарвиш^{b,c,2)}, С. А. Зеваков^d, М. Я. Кузин^a, А. С. Кузьменко^a,
М. И. Левчук^{e,f}, А. Ю. Логинов^g, Д. М. Николенко^d, И. А. Рачек^d, Д. К. Топорков^{d,h}, А. В. Юрченко^d,
А. И. Фикс^a, Ю. В. Шестаков^{d,h}

^aНациональный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

^bPhysics Department, Faculty of Science, Taibah University, 41411 Medina, Saudi Arabia

^cPhysics Department, Faculty of Science, Sohag University, 82524 Sohag, Egypt

^dИнститут ядерной физики имени Г. И. Будкера, 630090 Новосибирск, Россия

^eИнститут физики имени Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

^fИнститут прикладной физики, Национальная академия наук Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

^gТомский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634050 Томск, Россия

^hНовосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 2023 г.

После переработки 26 апреля 2023 г.

Принята к публикации 26 апреля 2023 г.

В работе представлены новые результаты для T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$, измеренной в области энергии фотонов в диапазоне от 300 до 600 МэВ. Данные получены на основе статистики, накопленной на ускорителе ВЭПП-3 в 2021 г. Для выделения T_{20} -компоненты использована асимметрия выхода реакции, связанная с изменением знака тензорной поляризации дейтериевой мишени. Экспериментальные данные сравниваются с результатами моделирования, выполненного на основе модели спектатора с учетом взаимодействия частиц в конечном состоянии.

DOI: 10.31857/S1234567823110010, EDN: diludp

Сильное взаимодействие является одним из четырех видов фундаментальных взаимодействий и играет определяющую роль в физике элементарных частиц и ядерной физике. Фундаментальная полевая теория сильного взаимодействия, квантовая хромодинамика (КХД), является составной частью Стандартной модели и описывает адронные процессы в терминах кварковых и глюонных степеней свободы. Характерной особенностью КХД является рост эффективной константы с уменьшением энергии. В результате, методы теории возмущений в рамках КХД становятся неприменимыми для описания динамики адронов в кинематической области $|q^2| < \Lambda^2$, где $|q^2|$ – модуль квадрата переданного 4-импульса, Λ – типичный масштаб КХД взаимодействий, составляющий несколько сотен МэВ. Данная область, соответствующая сравнительно малым переданным энер-

гиям и трехмерным импульсам, носит название области промежуточных энергий. В этой области процессы с участием адронов описываются, как правило, в терминах связанных кварковых состояний – нуклонов и мезонов, а основным инструментом исследования становятся феноменологические модели, использующие аппарат квантовой теории рассеяния в сочетании с элементами релятивистской квантовой теории, алгебры токов и т.п. Критерием реалистичности таких моделей является степень согласованности их предсказаний с результатами экспериментов.

При проведении экспериментов в физике элементарных частиц и ядерной физике часто используются поляризованные пучки и/или мишени. По сравнению с неполяризованным дифференциальным сечением, поляризационные наблюдаемые во многих случаях более чувствительны к различным механизмам и эффектам (релятивистские поправки, сход нуклонов с массовой поверхности, мезонные обменные токи, Δ -изобарные конфигурации, взаимодействие час-

¹⁾e-mail: gauzshtein@tpu.ru

²⁾E. Darwish.

тиц в конечном состоянии реакции). Последние могут играть важную роль в различных процессах в области промежуточных энергий. Так как используемые теоретические модели различаются прежде всего тем, как они учитывают вклады этих механизмов, именно поляризационные измерения часто выступают в качестве критерия выбора в пользу той или иной модели.

Одним из важных механизмов процессов с образованием адронов является взаимодействие (перерассеяние) частиц в конечном состоянии реакции. Детальный обзор влияния перерассеяния в конечном состоянии для реакций $\gamma d \rightarrow \pi NN$ приведен в работах [1, 2]. В частности, в [1] рассматривается отдельный вклад NN , πN и двухпетлевых диаграмм в дифференциальное и полное сечения. В работе [2] акцент исследования сделан на поляризационные наблюдаемые. В настоящей работе рассмотрено влияние этого явления на величину T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности для некогерентного фоторождения отрицательно заряженного пиона на дейтроне, $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$. Сравнительно простая структура и малая энергия связи дейтрона делает эту реакцию подходящим объектом для изучения эффектов перерассеяния в реакциях на малонуклонных системах.

В настоящее время эксперименты по изучению некогерентного фоторождения π -мезонов на тензорно-поляризованном дейтроне проводятся только на внутренней тензорно-поляризованной газовой мишени ускорительно-накопительного комплекса ВЭПП-3 [3–12]. В работе [6] приведены первые результаты измерения тензорной асимметрии для реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$. Полученные данные были извлечены из статистики, накопленной в 2002–2003 гг. и имели довольно низкую статистическую точность.

Экспериментальные значения T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности, представленные в данной работе, получены из статистического материала, накопленного в 2021 г. В отличие от работы [6], представленные результаты имеют более высокую статистическую точность, но при этом охватывают меньшую кинематическую область. Это обстоятельство не позволяет провести корректного сравнения двух наборов экспериментальных результатов. Моделирование реакции выполнено в рамках модели [13], учитывает вклады импульсного приближения и перерассеяния в конечных πN и NN -подсистемах. Установлено, что перерассеяние дает существенный вклад в T_{20} -компоненту тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$. Как показано в работе [1] для диффе-

ренциального и полного сечений, основной вклад во взаимодействие частиц в конечном состоянии вносит NN -перерассеяние. Кроме того, учет перерассеяния в конечных πN и NN подсистемах приводит к существенному улучшению согласия между предсказаниями теории и экспериментальными данными.

В отсутствие векторной поляризации дейтронной мишени дифференциальное сечение фоторождения пионов на дейтроне может быть представлено в виде

$$d\sigma = d\sigma_0 \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} P_{zz} [d_{00}^2(\theta_H) T_{20} - d_{10}^2(\theta_H) \cos(\phi_H) T_{21} + d_{20}^2(\theta_H) \cos(2\phi_H) T_{22}] \right\}, \quad (1)$$

где $d\sigma_0$ – неполяризованное дифференциальное сечение реакции, $d_{TM}^M(\theta_H)$ – d -функции Вигнера:

$$\begin{aligned} d_{00}^2(\theta_H) &= \frac{3}{2} \cos^2(\theta_H) - \frac{1}{2}, \\ d_{10}^2(\theta_H) &= -\sqrt{\frac{3}{8}} \sin(2\theta_H), \\ d_{20}^2(\theta_H) &= \sqrt{\frac{3}{8}} \sin^2(\theta_H). \end{aligned} \quad (2)$$

В уравнении (1) коэффициенты T_{20} , T_{21} и T_{22} являются компонентами тензорной анализирующей способности реакции, коэффициент P_{zz} определяет степень тензорной поляризации дейтронной мишени, а углы θ_H и ϕ_H определяют ориентацию магнитного поля в системе координат с осью z , направление которой совпадает с направлением импульса налетающего фотона. Тензорная поляризация P_{zz} может быть выражена в терминах заселенностей n^{s_H} состояний дейтрона со спиновыми проекциями $s_H = -1, 0, +1$ на направление магнитного поля $\mathbf{H}$:

$$P_{zz} = 1 - 3n^0 = 3(n^+ + n^-) - 2. \quad (3)$$

В данном эксперименте магнитное поле было направлено вдоль пучка фотонов, так что угол $\theta_H = 0$. Из этого следует, что в уравнении (1) вклад в дифференциальное сечение вносит только T_{20} -компонента тензорной анализирующей способности. Заметим также, что уравнение (1) справедливо только для копланарной кинематики, когда импульсы всех трех конечных частиц (двух нуклонов и пиона) лежат в одной плоскости.

Для выделения вклада T_{20} на протяжении набора экспериментальной статистики знак тензорной поляризации переключался каждые 30 с. Столь частые переключения позволяют подавить систематические ошибки. T_{20} -компонента тензорной анализирующей

способности рассчитывается в соответствии с формулой

$$T_{20} = \sqrt{2} \frac{N^+ - N^-}{P_{zz}^+ N^- - P_{zz}^- N^+}, \quad (4)$$

где $N^+(N^-)$ – число зарегистрированных событий для тензорной поляризации дейтронной мишени, равной $P_{zz}^+(P_{zz}^-)$.

Схема эксперимента приведена на рис. 1. Энергия электронного пучка составляла 800 МэВ. Внутри ускорительного кольца ВЭПП-3 встроена накопительная ячейка-мишень, в которую поступал газообразный дейтерий из источника поляризованных атомов (ИПА). Подробная информация об ИПА приведена в работе [14]. Триггер экспериментальной установки был настроен на регистрацию pn -, pp - и ed -совпадений. События, соответствующие регистрации двух протонов (pp -совпадения), были использованы для извлечения информации о реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$. Регистрация канала упругого рассеяния электронов на дейтроне (ed -совпадения) при малых переданных импульсах позволяет измерять степень тензорной поляризации дейтериевой мишени на протяжении набора статистики. Более подробное описание принципа работы LQ-поляриметра приведено в [15].

Несмотря на почти предельную степень тензорной поляризации дейтронов ($P_{zz}^+ \approx +1$ и $P_{zz}^- \approx -2$) на выходе из ИПА, внутри накопительной ячейки степень тензорной поляризации значительно снижается. Это вызвано взаимодействием атомов дейтерия со стенками ячейки, друг с другом и с импульсным магнитным полем пучка электронов накопителя. По данным LQ-поляриметра, средняя степень тензорной поляризации дейтериевой мишени за все время проведения эксперимента составила

$$P_{zz}^+ = 0.39 \pm 0.025 \pm 0.009, \quad P_{zz}^-/P_{zz}^+ = -1.7, \quad (5)$$

где первая ошибка P_{zz}^+ – статистическая, вторая – систематическая.

Приведенные в данной работе результаты измерения T_{20} соответствуют экспериментальной статистике, набранной без регистрации рассеянного электрона. При такой постановке эксперимента, подавляющая часть зарегистрированных событий соответствует близкому к 0° полярному углу рассеяния электрона. Таким образом, вклад в измеренную асимметрию от продольной поляризации квази-реальных фотонов будет пренебрежимо малым.

Кинематика исследуемой реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ восстанавливалась по измеренным 4-импульсам протонов в предположении, что полярный угол рассеяния

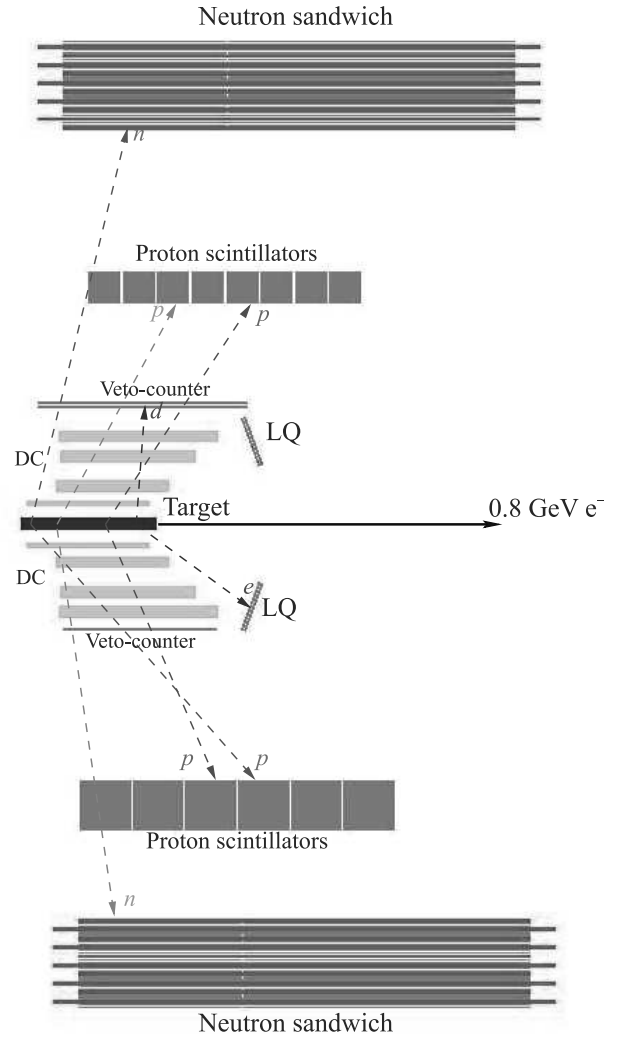


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента. События реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ соответствуют регистрации на совпадение двух протонов верхними и нижними протонными сцинтилляторами

электрона $\theta_e = 0^\circ$. Полярные и азимутальные углы вылета протонов измерялись с помощью дрейфовых камер с точностью, не хуже чем 0.6° . Кинетическая энергия протонов определялась по амплитуде световых выходов с сцинтиллятора, в котором останавливался протон. Интервал регистрации таких протонов составляет 60–160 МэВ. Идентификация протонов, зарегистрированных верхним плечом осуществлялась $\Delta E/E$ -методом (рис. 2, слева). В нижнем плече протоны идентифицировались по времени пролета и амплитуде (рис. 2, справа). При этом использовалось время пролета от тонкого ветона-счетчика до одного из протонных сцинтилляторов. Для оценки доли неотделимого фона в отобранную статистику pp -совпаде-

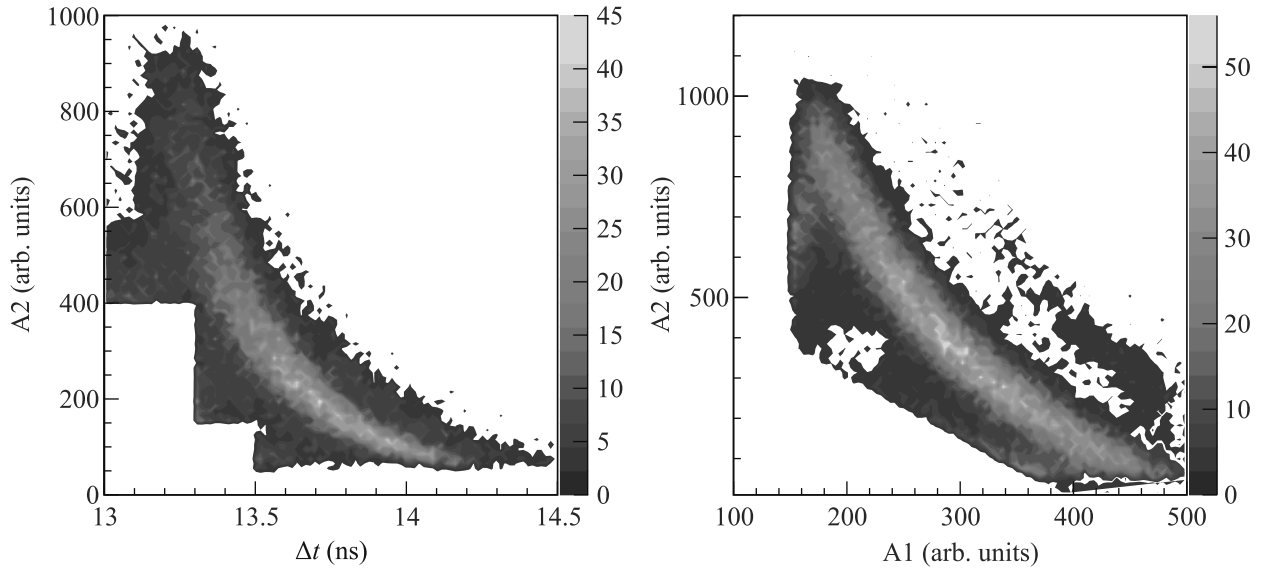


Рис. 2. (Цветной онлайн) Идентификация протонов. Слева – двумерная гистограмма распределения событий по амплитуде световыхода и времени пролета для нижнего протонного сцинтиллятора. Справа – двумерная гистограмма распределения событий по амплитуде протонного сцинтиллятора и тонкого вето-счетчика для верхнего детектора

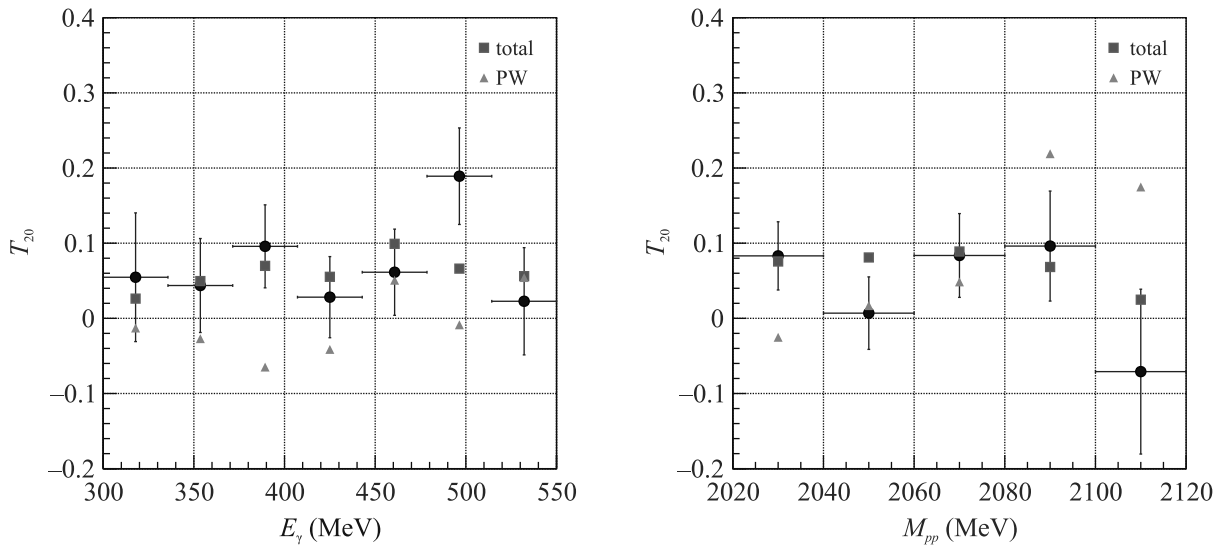


Рис. 3. (Цветной онлайн) Результаты измерения и статистического моделирования T_{20} . Слева – зависимость T_{20} от энергии фотона E_γ . Справа – зависимость T_{20} от двухчастичной инвариантной массы двух протонов M_{pp} . Зеленые треугольники – результат моделирования в плосковолновом приближении. Красные квадраты – результат моделирования с учетом πN и NN перерассеяния

ний было выполнено статистическое моделирование с применением пакета GEANT4 и генератора фото-реакций GENBOS [16]. Основными фоновыми процессами, дающими вклад в pp -совпадения, являются $\gamma d \rightarrow pp\pi^-\pi^0$, $\gamma d \rightarrow pn\pi^0$ и $\gamma d \rightarrow pn$. Вклад в неотделимый фон от процессов $\gamma d \rightarrow pn\pi^0$ и $\gamma d \rightarrow pn$ объясняется тем, что нейтроны при лобовом столкновении могут выбивать протоны, которые в свою очередь регистрируются протонными детекторами.

В результате моделирования было установлено, что неотделимый фон составляет около 7.3 %.

Результаты эксперимента приведены на рис. 3. Слева показана зависимость T_{20} от энергии фотона E_γ , справа – от двухчастичной инвариантной массы двух протонов M_{pp} . Для каждой точки показана погрешность измерения и интервал усреднения. Указанная погрешность измерения T_{20} включает в себя квадратично сложенные систематическую и ста-

статистическую ошибки. Наибольший вклад в систематическую ошибку составляет неопределенность степени поляризации мишени. Однако вследствие относительно малой отобранной статистики для исследуемой реакции (около 6000 событий), подавляющий вклад в погрешность измерения вносит статистическая ошибка. Также на рис. 3 приведены результаты для T_{20} , полученные методом статистического моделирования реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ с использованием модели [13]. Красные квадраты соответствуют моделированию, выполненному с использованием полной амплитуды, учитывающей вклады πN и NN перерассеяния. Зеленые треугольники соответствуют моделированию, выполненному в рамках плосковолнового импульсного приближения без учета вкладов πN и NN взаимодействий. Из приведенных результатов следует, что учет πN и NN перерассеяния в конечном состоянии реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ существенно улучшает согласие между экспериментом и теорией.

Учитывая чувствительность представленных результатов к деталям механизма реакции в нашей кинематической области, можно заключить, что согласие между экспериментальными данными и статистическим моделированием вполне удовлетворительное. Для улучшения согласия должны быть учтены другие возможные механизмы реакции. Последние могут включать, например, взаимодействие между нуклонным резонансом и нуклоном-спектатором в промежуточном состоянии, а также $\Delta\Delta$ -компоненту волновой функции дейтрона [17] и дополнительные вклады в NN -взаимодействие, которые могут быть важными на малых межнуклонных расстояниях [18–21].

Анализ экспериментальной статистики выполнен при поддержке Российского научного фонда, грант # 22-22-00016.

1. W. J. Briscoe, A. E. Kudryavtsev, I. I. Strakovsky, V. E. Tarasov, and R. L. Workman, *Eur. Phys. J. A* **58**, 23 (2022).
2. A. Fix and H. Arenhovel, *Phys. Rev. C* **72**, 064005 (2005).
3. Д. М. Николенко, Л. М. Барков, В. Ф. Дмитриев, С. А. Зеваков, Б. А. Лазаренко, С. И. Мишнев, А. В. Осипов, И. А. Рачек, Р. Ш. Садыков, В. Н. Стибунов, Д. К. Топорков, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 518 (2009).
4. I. A. Rachek, L. M. Barkov, S. L. Belostotsky et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **98**, 182303 (2007).
5. Д. М. Николенко, Дж. Аррингтон, Л. М. Барков и др. (Collaboration), *Ядерная физика* **78**, 423 (2015).
6. V. V. Gauzshtein, A. V. Gramolin, B. A. Lazarenko, A. Yu. Loginov, S. I. Mishnev, D. M. Nikolenko, I. A. Rachek, R. Sh. Sadykov, Yu. V. Shestakov, D. K. Toporkov, and S. A. Zevakov, *Nucl. Phys. A* **968**, 23 (2017).
7. S. E. Lukonin, V. V. Gauzshtein, M. I. Levchuk, A. Yu. Loginov, D. M. Nikolenko, I. A. Rachek, R. Sh. Sadykov, Yu. V. Shestakov, D. K. Toporkov, and S. A. Zevakov, *Nucl. Phys. A* **986**, 75 (2019).
8. V. V. Gauzshtein, E. Darwish, A. I. Fix, M. Ya. Kuzin, M. I. Levchuk, A. Yu. Loginov, D. M. Nikolenko, I. A. Rachek, R. Sh. Sadykov, Yu. V. Shestakov, D. K. Toporkov, A. V. Yurchenko, B. I. Vasilishin, and S. A. Zevakov, *Mod. Phys. Lett. A* **36**, 2150199 (2021).
9. V. N. Stibunov, L. M. Barkov, V. F. Dmitriev et al. (Collaboration), *J. Phys.: Conf. Ser.* **295**, 012115 (2011).
10. I. A. Rachek, V. F. Dmitriev, R. R. Dusaev, V. V. Gauzshtein, A. V. Gramolin, B. A. Lazarenko, S. I. Mishnev, D. M. Nikolenko, R. Sh. Sadykov, Yu. V. Shestakov, V. N. Stibunov, D. K. Toporkov, and S. A. Zevakov, *Few-Body Syst.* **58**, 29 (2017).
11. V. V. Gauzshtein, E. M. Darwish, M. Y. Kuzin et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. A* **56**, 169 (2020).
12. V. V. Gauzshtein, M. I. Levchuk, A. Yu. Loginov et al. (Collaboration), *Int. J. Mod. Phys. E* **29**, 2050011 (2020).
13. А. Ю. Логинов, А. А. Сидоров, В. Н. Стибунов, *Ядерная физика* **63**, 459 (2000).
14. M. V. Dyug, L. G. Isaeva, B. A. Lazarenko et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Methods A* **495**, 8 (2002).
15. M. V. Dyug, B. A. Lazarenko, S. I. Mishnev et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Methods A* **536**, 344 (2005).
16. A. S. Iljinov, I. A. Pshenichnov, N. Bianchi et al. (Collaboration), *Nucl. Phys. A* **616**, 575 (1997).
17. J. Haidenbauer and W. Plessas, *Phys. Rev. C* **30**, 1822 (1984).
18. Yu. F. Smirnov and Yu. M. Tchuvilsky, *J. Phys. G* **4**, L1 (1978).
19. V. I. Kukulin, I. T. Obukhovskiy, V. N. Pomerantsev, and A. Faessler, *J. Phys. G* **27**, 1851 (2001).
20. V. I. Kukulin, I. T. Obukhovskiy, P. Grabmayr, and A. Faessler, *Phys. Rev. C* **74**, 064005 (2006).
21. V. I. Kukulin, O. A. Rubtsova, M. N. Platonova, V. N. Pomerantsev, H. Clement, and T. Skorodko, *Eur. Phys. J. A* **56**, 229 (2020).

О возможности изготовления $\mathcal{PT}$ -симметричных оптических димеров без поглощающего свет материала

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

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

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

Поступила в редакцию 30 марта 2023 г.

После переработки 17 апреля 2023 г.

Принята к публикации 28 апреля 2023 г.

Рассмотрен подход к созданию оптического димера частиц, работающих в спектральной области вблизи дипольного резонанса, обладающего свойствами симметрии четность–время. Предполагается, что обе частицы состоят из активной среды с одним и тем же показателем преломления и коэффициентом экстинкции. Мы предлагаем ввести контраст усиления–потери путем изменения радиационных потерь частиц за счет вариации их формы. Чтобы проиллюстрировать данный подход, мы рассмотрели димер, состоящий из заполненного и полого бесконечных цилиндров. Продемонстрировано, что увеличение диаметра полости приводит к более сильному радиационному затуханию. После, мы нашли параметры димера с исключительной точкой на вещественной частоте, в котором при увеличении контраста усиление–потери появляются две вещественные собственные частоты.

DOI: 10.31857/S1234567823110022, EDN: dinfox

За последнее десятилетие было проведено множество исследований в области неэрмитовой фотоники [1–4]. Связанная с неэрмитовостью системы контринтуитивная физика, которая проявляется, например, в вещественности спектра гамильтониана в системах с симметрией четность–время ($\mathcal{PT}$), и в вырождении (т.е. недиагонализруемости) гамильтониана в исключительных точках (EP), приводит к множеству оптических эффектов, таких как одномодовая лазерная генерация в системе из двух резонаторов [5], однонаправленная передача света без отражения [6, 7], нарушение взаимности [8] и расщепление собственных частот по корневому закону при снятии вырождения [9].

Данные эффекты были успешно продемонстрированы в системах, размеры которых значительно превышают длину волны, такие как связанные волноводы, связанные кольцевые и дисковые резонаторы и плоские слоистые структуры. Неэрмитовость вводится в эти системы как потери и усиление – за счет поглощения в среде и вынужденного излучения при наличии накачки соответственно [10], – или же путем пространственно структурированной оптической накачки активной среды [11]. Для создания неэрмитовых метаповерхностей с уникальными свойствами, основанными на $\mathcal{PT}$ -симметрии и исключительных

точках, необходимо использовать резонансные частицы, размер которых меньше или сравним с длиной волны. В этом случае применение пространственно структурированной накачки ограничено дифракционным пределом, а для изготовления метаматериала, элементарная ячейка которого состоит из активной среды и материала с поглощением, необходим сложный технологический процесс.

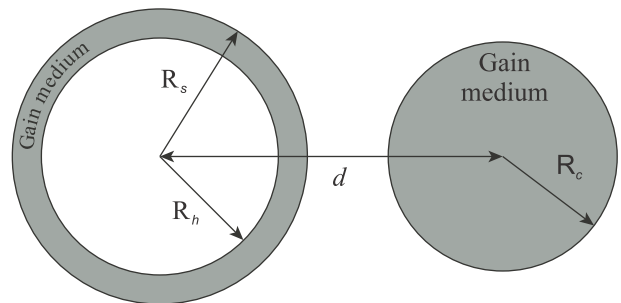


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эскиз исследуемой системы – димера полого цилиндра и заполненного цилиндра

В данной работе рассматривается идея подбора формы резонаторов, изготовленных из активной среды, таким образом, чтобы ввести в систему контраст усиление–потери за счет отличия в коэффициентах радиационного затухания, что позволит создать метаповерхность с $\mathcal{PT}$ -симметрией из одной только активной среды, работающей при равномерной накачке.

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

ке. Чтобы продемонстрировать применение данного подхода, мы рассмотрели простейшую систему, представляющую собой димер, изображенный на рис. 1, состоящий из бесконечного цилиндра из диэлектрической усиливающей среды и бесконечного же полого цилиндра из того же материала. Исследован случай ТЕ-поляризации, в которой вектор магнитного поля ориентирован вдоль осей цилиндра. Показано, что радиационные потери усиливаются при наличии полости, что обеспечивает возможность достижения контраста усиление–потери в димере из одного материала. Также была найдена геометрия димера, состоящего из цилиндра и полого цилиндра, реализующего режим исключительной точки (ЕР), и исследованы его собственные частоты и спектры рассеяния вблизи ЕР.

Фотоника в системах с $\mathcal{PT}$ симметрией и исключительными точками традиционно изучается в рамках хорошо известных из квантовой электродинамики в резонаторе (КЭД-р) неэрмитовых двухуровневых моделей путем сопоставления “уровней” локализованным возбуждениям в резонаторах или волноводах [12]. Системы, размеры которых значительно превышают длину волны, были всесторонне изучены и хорошо описываются этими моделями. Однако, несмотря на простоту двухуровневой модели, строгое рассмотрение лежащей в ее основе задачи о распространении электромагнитных волн часто оказывается довольно сложным. Причина этой сложности заключается в том, что, в отличие от КЭД-р, где связаны разные типы частиц (например, возбужденные электрон и фотон являются “уровнями”, а связь осуществляется посредством межуровневых квантовых переходов), в системах связанных оптических резонаторов, и “уровни”, и связь – это по существу одно и то же возбуждение, а именно, электромагнитное поле. Из этого следуют два утверждения, каждое из которых соответствует усложнению задачи.

Первое из них заключается в том, что обмен энергией между резонаторами осуществляется электромагнитными волнами, в которые входят запаздывающие потенциалы. Связь между резонаторами, в свою очередь, также подвержена эффектам запаздывания. В фотонике эффективный двухуровневый гамильтониан определяется как оператор эволюции системы во времени, и в данном случае он становится зависимым от своего же собственного значения, т.е. от частоты. Однако в случае, когда резонаторы большие по сравнению с длиной волны, их можно рассматривать как некое подобие волноводов, а в них благодаря трансляционной симметрии можно ввести волновой вектор, который и становится собственным

значением основного уравнения системы вместо частоты.

Вторая сложность связана с наличием радиационных потерь, что делает потери и связь неразделимыми. В волноводных структурах, таких как резонаторы на модах шепчущей галереи, потери на излучение обычно незначительны, при этом основным каналом потерь обычно является рассеяние либо поглощение, что позволяет исследовать систему связанных резонаторов при помощи двухуровневой модели. Напротив, когда размер резонаторов сравним с длиной волны, радиационные потери и связь между резонаторами остаются неразделимы [13].

Несмотря на эти сложности, двухуровневая модель может быть выведена для данной системы при помощи подхода, основанного на теории многократного рассеяния для связанных фотонных резонаторов, работающих на дипольном резонансе Ми, однако эффективный гамильтониан $\mathcal{H}$ оказывается зависимым от собственного значения [13]

$$\tilde{\omega}I - \mathcal{H} = \begin{bmatrix} \tilde{\omega} - \tilde{\omega}_c & i\Gamma_c H_0^{(1)}(\frac{\tilde{\omega}}{c}d) \\ i\Gamma_h H_0^{(1)}(\frac{\tilde{\omega}}{c}d) & \tilde{\omega} - \tilde{\omega}_h \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\omega}$ – комплексная собственная частота димера, $\tilde{\omega}_{c,h}$ – полюса рассеяния каждого рассеивателя димера (цилиндра и полого цилиндра) по отдельности, $\Gamma_{c,h}$ – соответствующие силы осцилляторов, $H_0^{(1)}(x)$ – функция Ханкеля первого рода, описывающая дипольное поле в двумерном пространстве, c – скорость света, а d – расстояние между центрами цилиндров.

Для описания электромагнитных волн вокруг цилиндров мы используем базис мультиполей, построенных на функциях Бесселя и Ханкеля. В этом случае рассеяние на цилиндре описывается коэффициентами Лоренца–Ми. Для бесконечных цилиндров радиуса R_c коэффициент рассеяния Лоренца–Ми может быть выражен как

$$a_c = \frac{T_{21}^{(c)}}{T_{11}^{(c)}}, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} T_{11}^{(c)} &= H_l^{(1)}(x)J'_l(\tilde{n}x) - \tilde{n}H_l^{(1)'}(x)J_l(\tilde{n}x), \\ T_{12}^{(c)} &= H_l^{(1)}(x)H_l^{(1)'}(\tilde{n}x) - \tilde{n}H_l^{(1)'}(x)H_l^{(1)}(\tilde{n}x), \\ T_{21}^{(c)} &= \tilde{n}J'_l(x)J_l(\tilde{n}x) - J_l(x)J'_l(\tilde{n}x), \\ T_{22}^{(c)} &= \tilde{n}H_l^{(1)}(\tilde{n}x)J'_l(x) - H_l^{(1)'}(\tilde{n}x)J_l(x), \end{aligned}$$

$\tilde{n} = n + ik$ – показатель преломления цилиндра, l – азимутальное число, которое в случае диполей равно нулю, и $x = \omega R_c/c$.

Полюсы рассеяния – это точки, в которых знаменатель двумерного коэффициента дипольного рассеяния Лоренца–Ми равен нулю, т.е. $T_{11}^{(c)}(\omega = \tilde{\omega}_c) = 0$. Решая это уравнение относительно $\tilde{\omega}_c$, получаем показатель преломления $\tilde{n}_c$ цилиндра, имеющего полюс рассеяния на частоте $\tilde{\omega}_c = \omega_c - i\gamma_c$. После этого коэффициент Лоренца–Ми можно аппроксимировать вблизи полюса рассеяния выражением

$$a_c \simeq \frac{-i\Gamma_c}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_c}, \quad \Gamma_c = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow \tilde{\omega}_c} i(\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_c)a_c, \quad (3)$$

где Γ_c – сила осциллятора.

Далее рассмотрим полый цилиндр, который можно исследовать как частицу ядро–оболочка. Применяя граничные условия на границах раздела, можно получить следующую формулу для коэффициента рассеяния Лоренца–Ми полого цилиндра с оболочечным показателем преломления $\tilde{n}$, внешним радиусом R_c и внутренним радиусом R_h

$$a_h = \frac{T_{21}^{(c)}T_{11}^{(h)} + T_{22}^{(c)}T_{21}^{(h)}}{T_{11}^{(c)}T_{11}^{(h)} + T_{12}^{(c)}T_{21}^{(h)}}, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} T_{11}^{(h)} &= \tilde{n}H_l^{(1)}(\tilde{n}\xi)J_l'(\xi) - H_l^{(1)'}(\tilde{n}\xi)J_l(\xi), \\ T_{12}^{(h)} &= \tilde{n}H_l^{(1)}(\tilde{n}\xi)H_l^{(1)'}(\xi) - H_l^{(1)'}(\tilde{n}\xi)H_l^{(1)}(\xi), \\ T_{21}^{(h)} &= J_l'(\tilde{n}\xi)J_l(\xi) - \tilde{n}J_l(\tilde{n}\xi)J_l'(\xi), \\ T_{22}^{(h)} &= J_l'(\tilde{n}\xi)H_l^{(1)}(\xi) - \tilde{n}J_l(\tilde{n}\xi)H_l^{(1)'}(\xi), \end{aligned}$$

и $\xi = \tilde{\omega}R_h/c$.

Чтобы найти полюс рассеяния, вновь приравняем знаменатель коэффициента рассеяния к нулю:

$$\left[T_{11}^{(c)}T_{11}^{(h)} + T_{12}^{(c)}T_{21}^{(h)} \right] \Big|_{\tilde{\omega}=\tilde{\omega}_h} = 0. \quad (5)$$

Решая это уравнение относительно $\tilde{\omega}_h$, можно найти показатель преломления оболочки $\tilde{n}$ и радиус полости R_h , которые соответствуют полному цилиндру, имеющему полюс рассеяния на частоте $\tilde{\omega}_h = \omega_h - i\gamma_h$. В этом случае коэффициент рассеяния a_h можно аппроксимировать вблизи полюса таким же образом, как в формуле (3).

Исследуем зависимость радиационных потерь от радиуса полости. На рисунке 2а, б показаны зависимости собственной частоты ω_h и коэффициента затухания собственных состояний γ_h полых цилиндров с различными показателями преломления от диаметра полости, а на рис. 2с приведены соответствующие силы осцилляторов Γ_h . Видно, что потери увеличиваются с увеличением диаметра полости. Чтобы различить увеличение радиационных потерь и уменьшение объема усиливающей среды, были рассмотрены

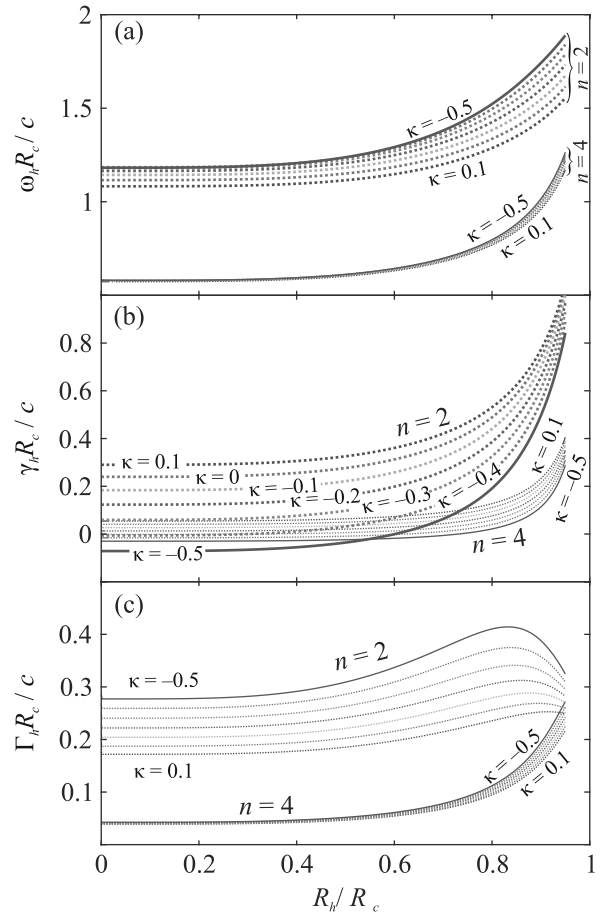


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости дипольного полюса рассеяния бесконечного полого цилиндра из диэлектрика с комплексным показателем преломления $\tilde{n} = n + i\kappa$ от радиуса полости (R_h), по отношению к внешнему радиусу (R_c): резонансная частота (а), коэффициент затухания резонансного состояния (б) и сила осциллятора (с). Рассматривается ТЕ-поляризация, показатели преломления $n = 2$ и $n = 4$, коэффициенты экстинкции $\kappa = -0.5, -0.4, \dots, +0.1$

усиливающие среды ($\kappa < 0$, показаны сплошной и штриховыми линиями), среды без потерь и усиления ($\kappa = 0$, показано пунктиром) и поглощающие среды ($\kappa > 0$, показано штрихпунктиром). Во всех трех случаях коэффициент затухания увеличивается при уменьшении объема среды, таким образом можно утверждать, что это увеличение связано с радиационными потерями.

Увеличение радиационных потерь сопровождается сдвигом частоты, как видно из рис. 2а. Поскольку нашей целью является ввести контраст усиления–потери без сдвига частоты, к полному цилиндру следует применить масштабное преобразование, чтобы компенсировать частотный сдвиг.

Теперь проанализируем собственные частоты димера, состоящего из цилиндра и полого цилиндра. Гамильтониан зависит от своих собственных значений, из-за чего уравнение на собственную частоту не является квадратичным. Поэтому для определения собственных частот димеров необходимо найти нули функции $f(\tilde{\omega})$, определенной следующим образом:

$$f(\tilde{\omega}) = \det(\tilde{\omega}I - \mathcal{H}). \quad (6)$$

Наша задача – найти исключительную точку, т.е. точку, в которой сливаются две или более собственных частот. Используя разложение Тейлора, нетрудно показать, что такая точка $\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}$ удовлетворяет следующим условиям:

$$\begin{cases} f(\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}) = 0, \\ f'(\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Решая эту систему уравнений относительно полюсов рассеяния $\tilde{\omega}_{c,h}$, приходим к следующему выражению

$$\tilde{\omega}_{c,h} = \tilde{\omega}_{\text{ЕР}} - A\Gamma_c\Gamma_h \left[\tau \pm \sqrt{\tau^2 + \frac{1}{\Gamma_c\Gamma_h}} \right], \quad (8)$$

где $A = H_0^{(1)}(\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}d/c)$ и $\tau = \frac{d}{c}H_1^{(1)}(\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}d/c)$. Используя формулу (8), можно найти полюса рассеяния частиц, которые, находясь на расстоянии d , образуют димер, находящийся в режиме исключительной точки, т.е. имеющий только одну собственную моду на частоте $\tilde{\omega}_{\text{ЕР}}$, вместо пары собственных мод на различных частотах.

Пользуясь формулой (8), найдем полюсы рассеяния димера, который, как ожидается, будет иметь исключительную точку на частоте $\tilde{\omega} = 1.186c/R_c$ (что соответствует длине волны в вакууме 530 нм и радиусу цилиндра $R_c = 100$ нм). Также, выберем и зафиксируем расстояние между центрами равным $d = 4.65R_c$, таким образом, чтобы получить чисто мнимую разность между полюсами рассеяния, необходимую для режима $\mathcal{PT}$ -симметрии. Формула (8) в этом случае дает следующие полюса рассеяния: $\tilde{\omega}_c = (1.19 + 0.0642i)c/R_c$, что соответствует $\tilde{n} = 1.99 - 0.488i$ и $\tilde{\omega}_h = (1.19 - 0.161i)c/R_c$. Чтобы приравнять частоты ω_c и ω_h , применим к полному цилиндру масштабное преобразование, таким образом, чтобы его внешний радиус стал равен $R_s = 1.286R_c$, где R_c – радиус цилиндра без отверстия. Радиус полости, соответствующий полюсу рассеяния в точке $\tilde{\omega}_h$, равен $R_h = 0.8R_s$. Силы осцилляторов цилиндров в этом случае оказываются равны $\Gamma_c = 0.28$ и $\Gamma_h = 0.317$.

Данные значения были подставлены в эффективный гамильтониан в уравнении (1). Затем, чтобы проверить, действительно ли система оказалась

в исключительной точке, введем симметричную отстройку $\delta\tilde{\omega} = \delta\omega - i\delta\gamma$ по частоте в полюсы рассеяния, определенные по формуле (8): $\tilde{\omega}_c = (1.19 + 0.0642i)c/R_c + \delta\tilde{\omega}/2$ и $\tilde{\omega}_h = (1.19 - 0.161i)c/R_c - \delta\tilde{\omega}/2$. Будем искать собственные частоты $\tilde{\omega}_{\pm} = \omega_{\pm} - i\gamma_{\pm}$ гамильтониана, как зависимость комплексной расстройки $\delta\tilde{\omega}$. Полученные листы собственных частот, показанные на рис. 3, демонстрируют топологию, по-

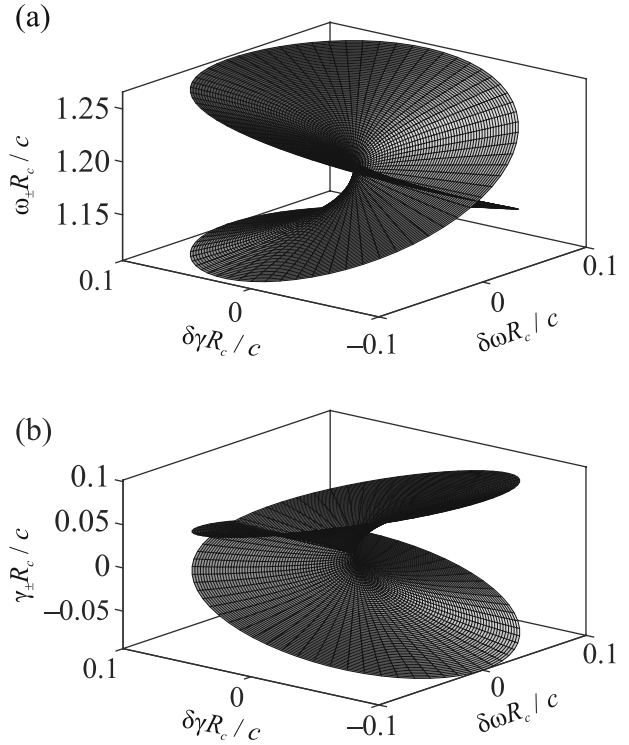


Рис. 3. (Цветной онлайн) Собственные частоты димера, состоящего из полого и заполненного цилиндров, как зависимость комплексной отстройки $\delta\omega - i\delta\gamma$ от исключительной точки: частота собственной моды (a), коэффициент затухания собственной моды (b)

добную римановой поверхности функции комплексного квадратного корня, что является характерным признаком исключительной точки [1, 3, 4]. Отметим также, что при изменении только контраста усиление–потери ($\delta\omega = 0$) наблюдается поведение по типу $\mathcal{PT}$ симметрии. Когда контраст усиление–потери уменьшается по сравнению с его значением в исключительной точке, димер имеет две чисто вещественные собственные частоты. Увеличение контраста усиление–потери, в свою очередь, приводит к поведению, подобному разрушению $\mathcal{PT}$ симметрии, с возникновением затухающей ($\gamma_{\pm} < 0$) и усиливающейся ($\gamma_{\pm} > 0$) мод на одной и той же частоте ($\omega_{\pm} = \omega_{\text{ЕР}}$). Заметим, однако, что сам димер не подчиняется $\mathcal{PT}$ симметрии в строгом смысле этого сло-

ва: из-за отличающейся геометрии рассеивателей (заполненный и полый цилиндр), композиция преобразований четности и инверсии времени дает систему, отличную от изначально рассматриваемого димера.

Наконец, рассмотрим спектры рассеяния на димере из активной среды с показателем преломления $n = 1.99$ и коэффициентом экстинкции $\kappa = -0.488$, состоящем из цилиндра радиусом R_c и полого цилиндра с внешним радиусом $R_s = 1.286 R_c$. Для получения спектров рассеяния мы используем описанную в литературе теорию многократного рассеяния [13–24], рассматривая только дипольный вклад. Возбуждение представляет собой плоскую волну с направлением падения, перпендикулярным плоскости, проходящей через оси цилиндров. Так как димер состоит из активной среды и находится в режиме излучения, мы рассматриваем вытекающую из димера энергию, которую определяем как сечение экстинкции, взятое со знаком минус. Спектры показаны на рис. 4 в зависимости от радиуса отверстия. Уменьшение размера отверстия приводит к уменьшению контраста усиление–потери в совокупности с небольшим сдвигом собственной частоты. Как результат, моды связаны сильнее, чем в исключительной точке, что обуславливает наличия расщепления по частоте. Увеличение радиуса полости соответствует увеличению контраста усиление–потери, что приводит к разрушению $\mathcal{PT}$ симметрии. В этом режиме собственные моды существуют отдельно в цилиндре, мода в котором оказывается излучательной, и в полом цилиндре, в котором локализуется затухающая мода на той же частоте.

Заключение. Мы рассмотрели бесконечные диэлектрические цилиндры с полостью и продемонстрировали, что радиационное затухание растет с увеличением диаметра полости. Эта зависимость позволила нам получить контраст усиление–потери между полым цилиндром и цилиндром без отверстия из того же материала. В дипольном приближении нами были получены уравнения для геометрических параметров димера, состоящего из цилиндра и полого цилиндра, имеющего исключительную точку на заданной частоте. Выбрав чисто вещественную частоту исключительной точки и расстояние, соответствующее чисто мнимой разности между полюсами рассеяния сплошного и полого цилиндра, мы смогли найти параметры димера с поведением, подобным $\mathcal{PT}$ симметрии. При уменьшении контраста усиление–потери данный димер имеет две чисто вещественные собственные частоты, а увеличение контраста усиление–потери приводит к появлению затухающей и усиливающейся мод на одной и той же

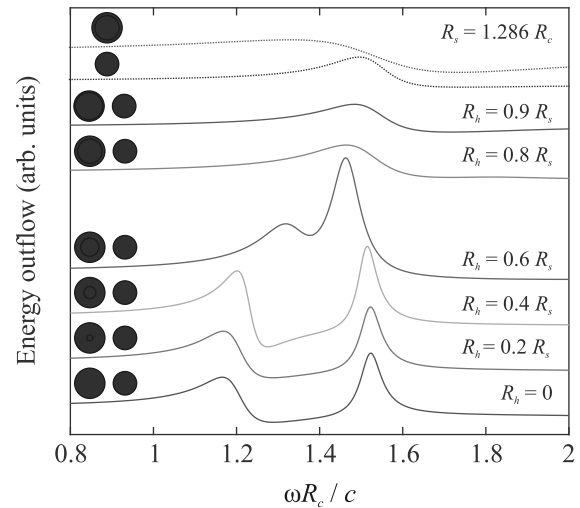


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектры вытекающей энергии димера полого (радиус R_s) и заполненного (радиус R_c) цилиндров из активной среды с показателем преломления $\tilde{n} = 1.99 - 0.488i$ при освещении плоской волной, в зависимости от радиуса полости (R_h). ТЕ поляризация

частоте. Мы проанализировали спектры рассеяния на димерах сплошного цилиндра и полого цилиндра с различным диаметром полости и показали, что уменьшение контраста усиление–потери за счет уменьшения диаметра полости приводит к расщеплению резонанса в спектрах.

Полученные результаты могут быть полезны для проектирования метаповерхностей, работающих в режимах, близких к $\mathcal{PT}$ симметрии и к исключительной точке. Мы признаем, что столь большое значение отрицательной мнимой части показателя преломления $\kappa = -0.5$, – необходимой для того, чтобы наш димер демонстрировал поведение по типу $\mathcal{PT}$ симметрии, не может быть достигнуто в активных средах оптического диапазона, где значения порядка $\kappa \sim 10^{-2}$ на данный момент являются порогом. Столь большое усиление требуется для компенсации значительного радиационного затухания дипольных резонансов. Вместе с тем, если радиационное затухание не скомпенсировано, то средние потери будут значительно больше контраста потерь, что приведет к невозможности пронаблюдать эффекты $\mathcal{PT}$ симметрии. Таким образом, переход к геометрическим резонансам более высокого порядка, таким как квадрупольные или октопольные состояния, для которых характерна более высокая добротность, представляется способом решить эту проблему. В частности, подходящей активной средой могут быть галогенидные перовскиты, так как на этой платформе экспери-

ментально продемонстрирована компенсация радиационных потерь усилением в квадрупольных и октопольных состояниях, приводящим к одночастичной генерации [25].

Бесконечные цилиндры были рассмотрены из-за простоты анализа. Для изготовления реальных структур необходимы частицы конечного размера, в роли которых могут выступать и конечные цилиндры. Для реализации в терагерцовом диапазоне могут быть использованы пустотелые волноводы, технология изготовления которых с диаметрами от 10 мкм является хорошо отработанной [26]. В оптическом же диапазоне при помощи электронной литографии могут быть изготовлены цилиндры с радиусом от 100 нм с отверстием внутри. Высота таких цилиндров может превышать радиус в несколько раз [27]. Однако в этом случае из-за взаимодействия мод Ми цилиндра с модами Фабри–Перо происходит сдвиг резонансной частоты относительно предсказанного теорией Ми значения (около 10 % в случае высоты цилиндра, равной трем радиусам [28]), который необходимо учитывать отдельно.

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

1. R. El-Ganainy, K. G. Makris, M. Khajavikhan, Z. H. Musslimani, S. Rotter, and D. N. Christodoulides, *Nat. Phys.* **14**, 11 (2018).
2. L. Feng, R. El-Ganainy, and L. Ge, *Nature Photon.* **11**, 752 (2017).
3. M.-A. Miri and A. Alù, *Science* **363**, eaar7709 (2019).
4. Ş. K. Özdemir, S. Rotter, F. Nori, and L. Yang, *Nat. Mater.* **18**, 783 (2019).
5. L. Feng, Z. J. Wong, R.-M. Ma, Y. Wang, and X. Zhang, *Science* **346**, 972 (2014).
6. Z. Lin, H. Ramezani, T. Eichelkraut, T. Kottos, H. Cao, D. N. Christodoulides, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 213901 (2011).
7. L. Feng, X. Zhu, S. Yang, H. Zhu, P. Zhang, X. Yin, Y. Wang, X. Zhang, *Opt. Express* **22**, 1760 (2013).
8. L. Feng, M. Ayache, J. Huang, Y.-L. Xu, M.-H. Lu, Y.-F. Chen, Y. Fainman, and A. Scherer, *Science* **333**, 729 (2011).
9. K. J. H. Peters and S. R. K. Rodriguez, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 013901 (2022).
10. B. Peng, Ş. K. Özdemir, F. Lei, F. Monifi, M. Gianfreda, G. L. Long, S. Fan, F. Nori, C. M. Bender, and L. Yang, *Nat. Phys.* **10**, 394 (2014).
11. H. Hodaie, A. U. Hassan, S. Wittek, H. Garcia-Gracia, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, and M. Khajavikhan, *Nature* **548**, 187 (2017).
12. A. F. Kockum, A. Miranowicz, S. D. Liberato, S. Savasta, and F. Nori, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 19 (2019).
13. A. A. Dmitriev and M. V. Rybin, *Phys. Rev. A* **99**, 063837 (2019).
14. A. Egel, L. Pattelli, G. Mazzamuto, D. S. Wiersma, and U. Lemmer, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **199**, 103 (2017).
15. D. Felbacq, G. Tayeb, and D. Maystre, *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, 2526 (1994).
16. K. M. Leung and Y. Qiu, *Phys. Rev. B* **48**, 7767 (1993).
17. P. Lloyd and P. Smith, *Adv. Phys.* **21**, 69 (1972).
18. P. Markoš and V. Kuzmiak, *Phys. Rev. A* **94**, 033845 (2016).
19. P. Markoš, *Opt. Commun.* **361**, 65 (2016).
20. E. E. Maslova, M. F. Limonov, and M. V. Rybin, *Opt. Lett.* **43**, 5516 (2018).
21. A. Moroz, *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 171 (1994).
22. N. A. Nicorovici, R. C. McPhedran, and L. C. Botten, *Phys. Rev. E* **52**, 1135 (1995).
23. G. Tayeb and S. Enoch, *J. Opt. Soc. Am. A* **21**, 1417 (2004).
24. X. Wang, X.-G. Zhang, Q. Yu, and B. Harmon, *Phys. Rev. B* **47**, 4161 (1993).
25. E. Tiguntseva, K. Koshelev, A. Furasova, P. Tonkaev, V. Mikhailovskii, E. V. Ushakova, D. G. Baranov, T. Shegai, A. A. Zakhidov, Y. Kivshar, and S. V. Makarov, *ACS Nano* **14**, 8149 (2020).
26. F. Yu, W. J. Wadsworth, and J. C. Knight, *Opt. Express* **20**, 11153 (2012).
27. Z.-B. Fan, H.-Y. Qiu, H.-L. Zhang, X.-N. Pang, L.-D. Zhou, L. Liu, H. Ren, Q.-H. Wang, and J.-W. Dong, *Light Sci. Appl.* **8**, 67 (2019).
28. M. V. Rybin, K. B. Samusev, P. V. Kapitanova, D. S. Filonov, P. A. Belov, Y. S. Kivshar, and M. F. Limonov, *Phys. Rev. B* **95**, 165119 (2017).

Сверхтонкий кристалл теллурида германия в сильном фемтосекундном лазерном поле: проявление квантоворазмерного эффекта

С. А. Асеев⁺¹⁾, Б. Н. Мионов⁺, И. В. Кочиков*, А. А. Лотин[×], А. А. Ищенко[°], Е. А. Рябов⁺¹⁾

⁺ ИСАН – Институт спектроскопии РАН, 108840 Москва, Троицк, Россия

* Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

[×] ИППИТ РАН – Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал Федерального государственного учреждения “Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника” Российской академии наук”, 140700 Шатура, Россия

[°] РТУ-МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова, 119571 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 апреля 2023 г.

После переработки 20 апреля 2023 г.

Принята к публикации 20 апреля 2023 г.

С помощью импульсного электронографа исследовано поведение тонкопленочного кристалла GeTe (GT), индуцированное воздействием интенсивных лазерных импульсов фемтосекундной длительности ($\lambda = 0.8 \mu\text{м}$). В качестве образца использовалась отожженная 20-нм пленка GT на медной сетке с углеродным покрытием. Установлено, что в результате лазерной абляции сформирован сверхтонкий кристалл теллурида германия (предположительно, монослой GeTe), обладающий высокой лучевой стойкостью. Обсуждаются возможные причины обнаруженного наноразмерного эффекта.

DOI: 10.31857/S1234567823110034, EDN: dirzfc

1. Введение. Халькогенидные соединения IV–VI групп химических элементов обладают устойчивыми фазовыми состояниями с возможностью использования в энергонезависимых устройствах хранения информации на базе контролируемого изменения степени упорядочения их структуры [1, 2]. Высокий контраст между кристаллическим и аморфным состояниями с существенно различающимися физическими свойствами в материалах фазовой памяти (МФП) открывает широкий спектр их практического применения [1, 2]. Контролируемый и, что особенно важно, обратимый фазовый переход может происходить под действием импульсов различной природы (тепловое воздействие, электрический импульс, импульсное лазерное излучение) [1–4]. Как следует из работ [1, 2], многообещающим является использование ультракороткого лазерного излучения. В рамках этого направления ранее продемонстрированы некоторые аспекты сверхбыстрого атермического (нетеплового) изменения структуры на примере тонкопленочного МФП $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST) [5–7]. В недавней работе [8] проведено комплексное исследование трансфор-

маций в 230-нм аморфном образце GST под действием ультракоротких лазерных импульсов и зарегистрирован переход от неустойчивости Рэлея–Плато к термокапиллярной конвекции Марангони, предшествующей процессу абляции.

Среди всего класса МФП выделяется теллурид германия, обладающий одной из самых простых кристаллических структур (ромбоэдрическая α -фаза с пространственной группой $R\bar{3}m$ и кубическая β -фаза с пространственной группой $Fm\bar{3}m$) [9, 10]. Цель настоящей работы – провести исследование тонкопленочного кристалла этого соединения с помощью электронной дифракции на просвет после воздействия на образец мощных одиночных лазерных импульсов фемтосекундной длительности и продемонстрировать формирование сверхтонкого GeTe кристалла, что может иметь важное фундаментальное и прикладное значение.

2. Экспериментальная часть. Эксперимент выполнен на компактном электронографе, достаточно подробно описанном в [11, 12]. На этом приборе для детектирования структурной динамики предусмотрено зондирование короткими электронными импульсами тонкопленочного кристаллического об-

¹⁾ e-mail: isanfemto@yandex.ru; ryabov@isan.troitsk.ru

разца, облученного фемтосекундным лазерным излучением, в рамках развития метода сверхбыстрой электронной дифракции [13]. Необходимым условием при этом является накопление сигнала от достаточно большого числа лазерных импульсов, что, в свою очередь, требует обратимости исследуемых лазерно-индуцированных фазовых переходов. Данный компактный электронограф (безмасляный вакуум на уровне $\sim 10^{-7}$ мм рт. ст.) может быть также использован в “классическом” режиме для наблюдения картин электронной дифракции от тонких кристаллов на просвет в статике.

Импульсный фотоэлектронный пучок (с энергией 36 кэВ и $\sim 10^3$ электронов в каждом импульсе) образован в результате облучения тонкопленочного золотого фотокатода УФ излучением III-й гармоники задающего фемтосекундного Ti:Sa лазера. В области образца диаметр зонда составляет около 100 мкм (в несколько раз меньше характерного размера облучаемой области) за счет действия постоянной магнитной линзы. Высокочувствительная схема регистрации собрана из пары микроканальных пластин (МКП) и люминофорного экрана, информация с которого считывалась CCD (ПЗС) матрицей.

В качестве образца взят тонкопленочный поликристалл GeTe толщиной 20 нм, полученный методом вакуумного термического напыления на коммерчески-доступную медную сетку с размером ячейки около 64 мкм, покрытую углеродной 15–20-нм пленкой (производство Ted Pella, Inc.). В эксперименте образец облучался *одиночными* мощными линейно-поляризованными 50-фс лазерными импульсами на длине волны 800 нм под углом 45 градусов. После перекрытия канала возбуждения, задающий Ti:Sa лазер переводился в 1-кГц режим, после чего образец (в течение 20 с) зондировался импульсным электронным пучком. Далее задающий лазер возвращали в режим одиночного импульса и увеличивали энергию в импульсе. В эксперименте предельная величина плотности энергии в лазерном импульсе порядка 40 мДж/см² определялась “паразитной” засветкой детектора. Лазерное воздействие в одно и то же место образца продиктовано ограниченной латеральной однородностью приготовленного кристалла на уровне нескольких сотен мкм.

3. Полученные результаты и их анализ. Электронограмма 20-нм кристалла GeTe представлена на вставке к рис. 1. Набор контрастных дифракционных колец свидетельствует об явно выраженной поликристаллической структуре образца. Используя известные методы электронографии [14],

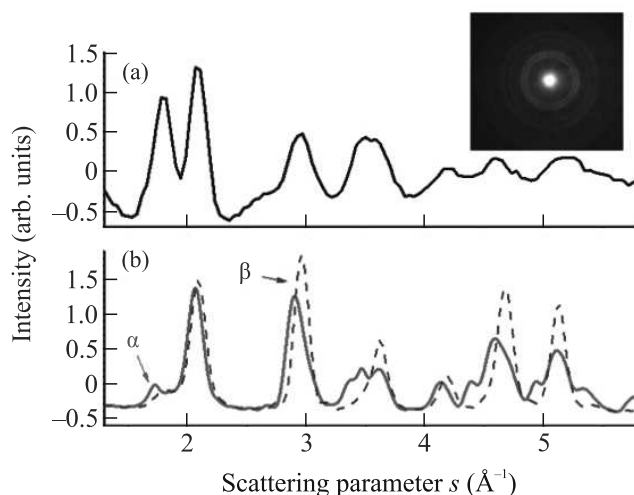


Рис. 1. (Цветной онлайн) Радиальное распределение интенсивности рассеяния электронов от GeTe, отражающее положения дифракционных максимумов: эксперимент (a), расчет для альфа-фазы – сплошная линия и бета-фаза – пунктирная линия (b). На вставке вверху представлена электронограмма от 20-нм пленки кристалла GeTe, полученная при накоплении сигнала от 2×10^4 электронных импульсов (20-сек экспозиция наблюдения)

осуществлено моделирование распределения интенсивности дифрагированных электронов в плоскости детектора для поликристаллов α и β фаз GeTe. Экспериментальные данные приведены на рис. 1a, а результаты расчета для α - и β -фаз теллурида германия – на рис. 1b. При выбранных параметрах измерений в данном эксперименте (длина волны де-Бройля $\lambda_{dB} \approx 0.064 \text{ \AA}$, расстояние от образца до детектора ~ 200 мм) диапазон регистрируемых параметров рассеяния $s = (4\pi/\lambda_{dB}) \sin(\theta/2)$, где θ – угол рассеяния, лежит в диапазоне $\sim 1 \text{ \AA}^{-1} < s < 6 \text{ \AA}^{-1}$. Нижняя величина определяется областью экрана, “засвеченной” в результате попадания нерассеянного электронного пучка, тогда как верхняя – размером детектора.

Как следует из рис. 1, все зарегистрированные линии можно отождествить. Однако заметны отличия амплитуд дифракционных пиков в эксперименте от рассчитанных величин. В первую очередь, это относится к дифракционному максимуму при $s \approx 1.8 \text{ \AA}^{-1}$. Здесь, по-видимому, имеет место случайное совпадение пиков от альфа- и бета-фазы GeTe с дифракционным пиком от углеродной подложки. Отметим, что для необлученной подложки этот пик отсутствует. Облучение чистой подложки мощными фс импульсами приводит к появлению пика на $s \approx 1.9 \text{ \AA}^{-1}$, характерного для одной из аллотропных форм углерода – графита [15], и что связано, по-видимому, с графитизацией подложки в резуль-

тате ее нагрева излучением. Поэтому мы полагаем, что основной вклад в пик на $s \approx 1.8 \text{ \AA}^{-1}$ на рис. 1а дает графит, образующийся в процессе термического отжига напыленного GeTe, необходимого для получения кристаллической пленки.

На рисунке 2 представлена зависимость интегральной интенсивности дифракционной картины,

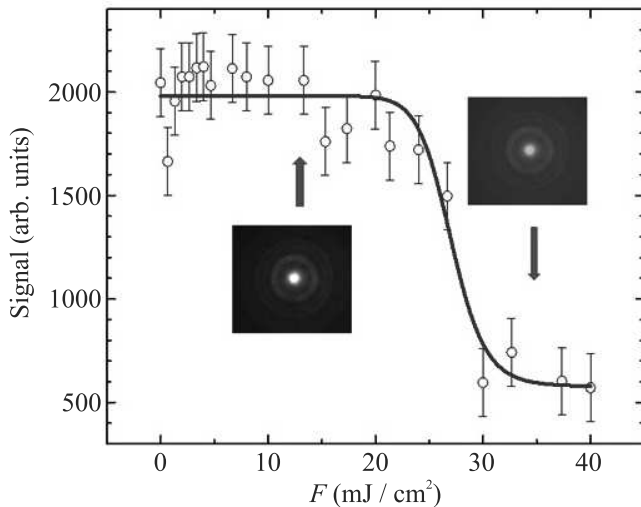


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость интегрального сигнала на детекторе (включая сигнал, отвечающий диффузному рассеянию электронов) от плотности энергии лазерного излучения F . Экспериментальные данные обозначены полыми кружками. Аппроксимация представлена сигмоидальной кривой. На вставках представлены электронограммы: от 20-нм пленки кристалла GeTe (слева) и от сверхтонкого, предположительно, монослоя GT (справа)

включая сигнал, отвечающий диффузному рассеянию электронов, от плотности энергии облучающего лазерного импульса F . После достижения уровня возбуждения $F = F_{thr} \sim F_{abl} \sim 28 \text{ мДж/см}^2$ зарегистрировано существенное падение сигнала вследствие абляции, что свидетельствовало о значительном уменьшении толщины исследуемого образца в эксперименте. (Ранее при исследовании МФП на примере тонкопленочного полупроводника GST [6] порог фемтосекундной лазерной абляции составил величину $\sim 30 \text{ мДж/см}^2$, что практически совпадает с нашими измерениями, выполненными с более простым бинарным соединением, относящимся также к классу материалов фазовой памяти.)

Полученная в результате абляционного испарения сверхтонкая пленка сохраняла свойства GeTe (что проявлялось в электронограмме, характерной для этого соединения (правая вставка на рис. 2)) и оказалась устойчивой к воздействию сильного лазерного поля в диапазоне $F \sim 30\text{--}40 \text{ мДж/см}^2$. Со-

гласно оценкам толщина пленки была менее 4 нм. На наш взгляд, такое поведение вещества обусловлено проявлением квантово-размерного эффекта, когда сверхтонкие, в пределе однослойные структуры приобретают новые свойства. Так, ранее на примере MoS₂ [16] при облучении образца фемтосекундными лазерными импульсами было показано, что лучевая стойкость однослойного дисульфида молибдена в несколько раз выше, чем у объемного полупроводника.

Для объяснения рассмотрим следующую модель. Абляция и лазерно-индуцированное разрушение кристаллической решетки может произойти, когда плотность возбужденных состояний достигнет критического значения. Ширина запрещенной зоны в тонкопленочных полупроводниках E_C существенно зависит от их толщины d , и с уменьшением d ширина запрещенной зоны значительно возрастает. Поправка, возникающая в результате квантования доступных возбужденных состояний в очень тонких структурах, обычно имеет масштабы $\Delta E_C \sim d^{-2}$ (эта зависимость получается, если учесть, что $p \sim \Delta p \sim \hbar/\Delta x \sim 1/d$. Отсюда следует, что $\Delta E_C \sim p^2 \sim 1/d^2$) [17].

Тогда как объемный теллурид германия является непрямозонным полупроводником с малой шириной запрещенной зоны (менее 1 эВ), монослой GeTe представляет собой непрямозонное соединение, где ширина оптической щели – около 1.8 эВ [18]. Учитывая энергию кванта 1.55 эВ в нашем лазерном пучке, однофотонное поглощение преобладает для многослойного GeTe, в то время как монослой может быть возбужден только за счет 2-фотонного поглощения (2FA), вероятность которого существенно ниже (рис. 3). Соответственно, лучевая стойкость сверхтонкого кристалла GT в условиях эксперимента в рамках такой модели оказывается значительно выше по сравнению с объемным (“bulk”) полупроводником, что подтверждается результатами эксперимента. При уменьшении толщины пленки теллурида германия до монослоя материал становится прозрачным на длине волны 0.8 мкм, что, на наш взгляд, “останавливает” процесс абляционного испарения.

3. Заключение. Кристалл теллурида германия с начальной толщиной 20 нм подвергался воздействию мощных одиночных 800-нм импульсов фемтосекундной длительности с *in situ* электронным зондированием образовавшейся структуры. В эксперименте зарегистрирован процесс абляции GeTe и определен ее порог $F_{abl} \approx 28 \text{ мДж/см}^2$ (F – плотность энергии лазерного импульса). Показано, что при $F = F_{thr} \approx F_{abl}$ удалось получить сверхтонкий слой GeTe, ко-

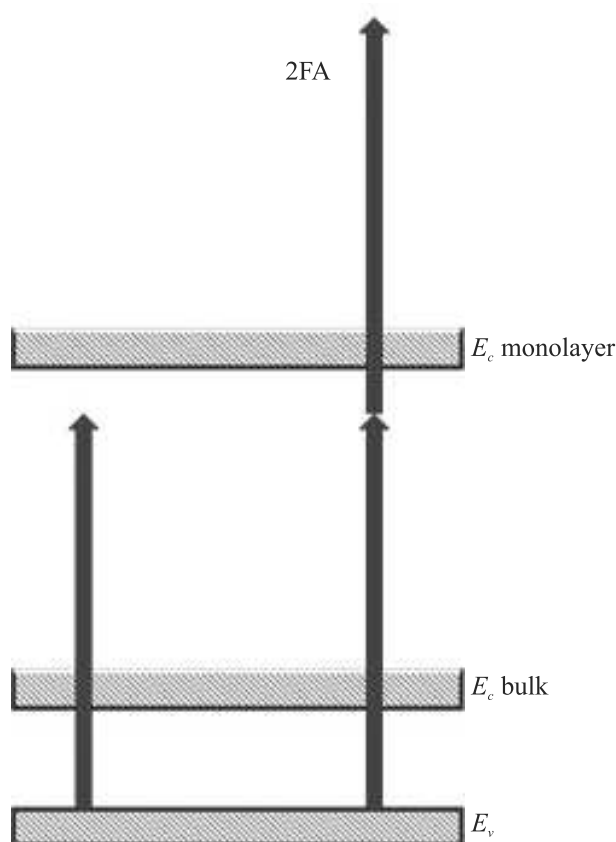


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема, иллюстрирующая оптическое возбуждение объемного и однослойного кристалла GeTe за счет однофотонного и двухфотонного процесса поглощения (2FA) на длине волны 800 нм (энергия кванта 1.55 эВ)

торый, с одной стороны, успешно идентифицирован по электронограмме, характерной для кристаллического состояния этого химического соединения, а с другой стороны, оказался устойчивым к воздействию сильного лазерного поля фемтосекундной длительности в диапазоне $F \sim 30\text{--}40\text{ мДж/см}^2$.

Приведены аргументы, указывающие на проявление квантово-размерного эффекта и достижение в эксперименте предположительно однослойного кристалла GeTe в результате контролируемого абляционного испарения. Полученные результаты представляют особый интерес. Во-первых, это важно с точки зрения возможной миниатюризации запоминающих устройств и перехода на практике к предельным размерам.

А во-вторых, в этом случае становится корректным расчет электронограмм в рамках кинематического приближения без учета многократных рассеяний электронов в образце. Действительно, из-за сильного упругого и неупругого рассеяния электронов, кинематическая теория применима исключи-

тельно для очень тонких кристаллов [19, 20]. Для “толстых” образцов разработаны основы динамической теории [21]; однако ее использование на практике для анализа экспериментальных данных в значительной степени затруднено сложностью учета всего многообразия взаимодействий электронов с исследуемым образцом [19]. Продемонстрированный подход открывает возможность использования существенно более простой методологии для интерпретации данных электронографии.

С тонкопленочным кристаллом GeTe в сильном 50-фс лазерном поле нам не удалось получить убедительных свидетельств в пользу светиндуцированного фазового перехода из кристаллического состояния в аморфное. Для успешной реализации такого процесса возможно необходимо использование более длинных лазерных импульсов, что является предметом отдельных исследований. Так, ранее на примере 100-нм пленки GT продемонстрированы обратимые фазовые переходы, индуцированные наносекундным лазерным излучением [22, 23].

Данная статья подготовлена в рамках выполнения работ по Госзаданию FFUU-2022-0004.

1. M. Wuttig, H. Bhaskaran, and T. Taubner, *Nature Photon.* **11**, 465 (2017).
2. С. А. Козюхин, П. И. Лазаренко, А. И. Попов, И. Л. Еременко, *Успехи химии* **91**, RCR5033 (2022).
3. B. J. Kooi and M. Wuttig, *Adv. Mater.* **32**, 1908302 (2020).
4. P. Kerres, Y. Zhou, H. Vaishnav et al. (Collaboration), *Small* **18**, 2201753 (2022).
5. H. Wu, W. Han, and X. Zhang, *Materials* **15**, 6760 (2022).
6. L. Waldecker, T. A. Miller, M. Rude, R. Bertoni, J. Osmond, V. Pruneri, R. E. Simpson, R. Ernstorfer, and S. Wall, *Nature Mater.* **14**, 991 (2015).
7. Y. Qi, N. Chen, Th. Vasileiadis, D. Zahn, H. Seiler, X. Li, and R. Ernstorfer, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 135701 (2022).
8. T. Kunkel, Y. Vorobyov, M. Smayev, P. Lazarenko, Al. Kolobov, and S. Kozuykhin, *Appl. Surf. Sci.* **624**, 157122 (2023).
9. J. M. Leger and A. M. Redon, *J. Phys.: Condens. Matter.* **2**, 5655 (1990).
10. A. Onodera, I. Sakamoto, and Y. Fujii, *Phys. Rev. B* **56**, 7935 (1997).
11. Б. Н. Миронов, В. О. Компанец, С. А. Асеев, А. А. Ищенко, И. В. Кочкиков, О. В. Мисочко, С. В. Чекалин, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **151**, 494 (2017).
12. S. A. Aseyev, E. A. Ryabov, B. N. Mironov, I. V. Kochikov, and A. A. Ischenko, *Chem. Phys. Lett.* **797**, 139599 (2022).

13. D. Filippetto, P. Musumeci, R.K. Li, B.J. Siwick, M.R. Otto, M. Centurion, J.P.F. Nunes, Rev. Mod. Phys. **94**, 045004 (2022).
14. А. А. Ищенко, Г. В. Гиричев, Ю. И. Тарасов, *Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества*, Физматлит, М. (2013).
15. V.L. Deringer, G. Csanyi, and D.M. Proserpio, ChemPhysChem **18**, 873 (2017).
16. I. Paradisanos, E. Kymakis, C. Fotakis, G. Kioseoglou, and E. Stratakis, Appl. Phys. Lett. **105**, 041108 (2014).
17. R. Dingle, W. Wiegmann, and C.H. Henry, Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974).
18. D. Zhang, Z. Zhou, H. Wang, Z. Yang, and Ch. Liu, Nanoscale, Res. Lett. **13**, 400 (2018).
19. I.G. Vallejo, G. Galle, B. Arnaud, Sh.A. Scott, M.G. Lagally, D. Boschetto, P.-E. Coulon, G. Rizza, Fl. Houdellier, D. Le Bolloc'h, and J. Faure, Phys. Rev. B **97**, 054302 (2018).
20. D.B. Durham, C. Ophus, Kh. M. Siddiqui, A. M. Minor, and D. Filippetto, Struct. Dyn. **9**, 064302 (2022).
21. П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон, Д. Пэшли, М. Уэлан, *Электронная микроскопия тонких кристаллов*, пер. с англ., Мир, М. (1968).
22. A.V. Kiselev, V.A. Mikhalevsky, A.A. Burtsev, V.V. Ionin, N.N. Eliseev, and A.A. Lotin, Optics and Laser Techn. **143**, 107305 (2021).
23. A.A. Burtsev, N.N. Eliseev, V.A. Mikhalevsky, A.V. Kiselev, V.V. Ionin, V.V. Grebenev, D.N. Karimov, and A.A. Lotin, Mater. Sci. in Semiconductor Proc. **150**, 106907 (2022).

Случайный лазер на основе материалов в виде сложных сетевых структур

А. Ю. Баженов⁺, М. М. Никитина⁺, Д. В. Царёв⁺, А. П. Алоджанц^{+,1)}

⁺Национальный исследовательский университет ИТМО,
197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 18 апреля 2023 г.

После переработки 22 апреля 2023 г.

Принята к публикации 22 апреля 2023 г.

В работе впервые предложена теория случайного лазера, интерфейс которого составляют случайные, или безмасштабные сети, в узлах которых находятся микрорезонаторы с квантовыми двухуровневыми системами. Микрорезонаторы связаны между собой светопроводящими каналами, образующими ребра сети. Показано, что такой лазер обладает рядом особенностей в спектре, связанных со статистическими свойствами сетевой структуры. Среди них – существование топологически защищенного собственного значения Перрона, обусловленного наличием сильного среднего поля в узле максимального влияния, расположенного в центральной части сети, делокализация/локализация мод излучения в зависимости от вероятности связи произвольных микрорезонаторов между собой. Полученные результаты открывают перспективы в области создания новых низкопороговых источников лазерного излучения.

DOI: 10.31857/S1234567823110046, EDN: djcfc

Случайные лазеры (СЛ) можно назвать одним из наиболее интересных проявлений образования макроскопической когерентности в результате случайного рассеяния света в неупорядоченной, оптически активной среде [1]. Основные физические принципы, на которых функционируют современные СЛ, фактически были предложены еще В. С. Летоховым для атомных систем [2]. Эти принципы постоянно дополняются и уточняются с учетом того многообразия сред, в которых эффект СЛ наблюдается в эксперименте [1, 3–5]. Поскольку такие лазеры не требуют наличия внешних резонаторов, их свойства определяются величиной рассеяния излучения в среде. Слабое рассеяние фотонов на частицах среды формирует диффузионный режим СЛ, в то время как сильное рассеяние ведет к андерсоновской локализации излучения [3]. По сути, эти ключевые свойства и делают СЛ весьма полезными на практике.

Однако до сих пор требует изучения вопрос о том, в какой мере неупорядоченность среды может влиять на режимы СЛ, ср. с [6]. В этой связи выделим работу [4], где авторы продемонстрировали реализацию СЛ на структуре нановолокон, образующей случайный граф, помещенных в краситель родамин 6G, “ответственный” за усиление излучения. В [7, 8] при анализе формирования когерентного (на макроскопическом уровне) излучения в сложных сетевых структу-

рах нами было показано, что порог лазерной генерации быстро убывает с увеличением связности графа, моделирующего среду, что экспериментально было выявлено в [4] для СЛ. Здесь уместно отметить, что исследование таких сложных сетевых структур является одним из наиболее интересных и важных направлений современной физики, имеющим ярко выраженное междисциплинарное значение [9].

Целью работы является выяснение физики формирования лазерного излучения в среде, топологически представляющей собой случайный (рис. 1а), или безмасштабный (рис. 1б) ненаправленный граф, образованный связанными микрорезонаторами (МР).

Рассматриваемую систему можно представить как некоторую сеть, в узлах которой находятся двухуровневые системы (ДУС), к примеру, квантовые точки. Этого можно добиться, например, как в [5], разместив ДУС в фотоникристаллической структуре, обладающей каналами распространения фотонов. С другой стороны, ДУС можно поместить в МР, физически представляющие связанные между собой микро столбики [10]. В данной работе для определенности остановимся на модели связанных МР, ср. с [11]. Таким образом, модель СЛ представляет собой N МР, каждый из которых содержит одинаковые ДУС, характеризующиеся резонансной частотой (энергией) перехода ω_0 . Микрорезонаторы находятся в узлах сложной сети, ребра которой без потерь проводят свет. Поле в каждом i -м МР характеризуется опе-

¹⁾e-mail: alexander_ap@list.ru

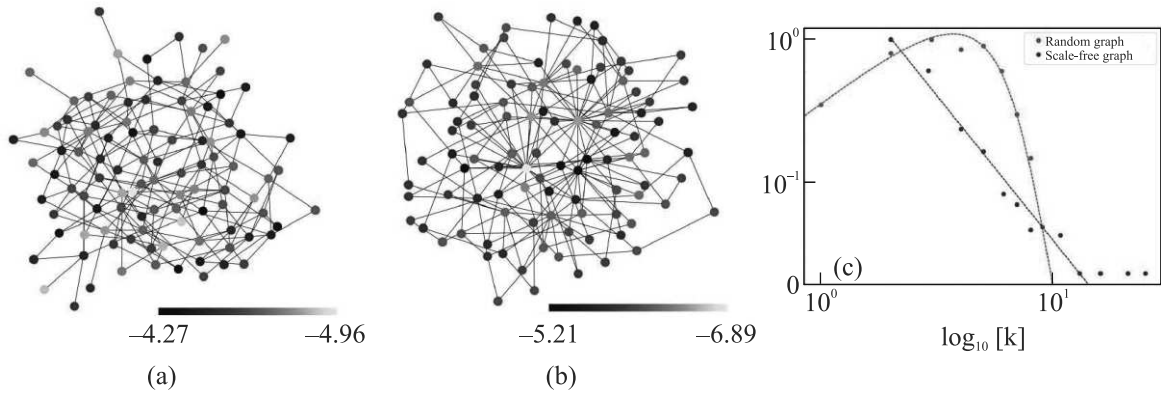


Рис. 1. (Цветной онлайн) Интерфейс среды случайного лазера в виде: (а) – случайной ($k_{\max} = 9$, $k_{\min} = 1$) и (б) – безмасштабной ($k_{\max} = 25$, $k_{\min} = 2$) сети при $N = 100$; $k_{\max}/\min$ – максимальное/минимальное значение степеней узлов. Цветовые панели характеризуют собственные значения матрицы смежности τ_{ij} . (с) – Распределение степеней узлов соответствующих сетей в двойном логарифмическом масштабе. Остальные детали приведены в тексте

ратором уничтожения (рождения) $\hat{f}_i$ ($\hat{f}_i^\dagger$) фотонов, $i = 1, \dots, N$. В рамках приближения вращающейся волны оператор Гамильтона системы можно представить в виде (ср. с [12]):

$$\hat{H} = \hbar \sum_{i=1}^N \left[\frac{\omega_0 \hat{\sigma}_i^z}{2} + \omega_{ph,i} \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_i + g(\hat{f}_i \hat{\sigma}_i^+ + \hat{f}_i^\dagger \hat{\sigma}_i^-) \right] - \frac{\hbar J}{2} \sum_{i,j=1}^N \tau_{ij} (\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_i + \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_j), \quad (1)$$

где ДУС i -го МР характеризуется оператором инверсии $\hat{\sigma}_i^z$, а также лестничными операторами, $\hat{\sigma}_i^\pm$; g – параметр взаимодействия ДУС с квантовой модой поля i -го МР частоты $\omega_{ph,i}$. В (1) $J > 0$ определяет взаимодействие МР между собой посредством волноводов (фотонных каналов), которое учитывается с помощью матрицы смежности τ_{ij} , элементы которой обладают свойствами $\tau_{ij} = \tau_{ji}$, $\tau_{ii} = 0$. При этом p_{ij} есть вероятность связи между i -м и j -м МР (в таком случае соответствующий элемент матрицы смежности $\tau_{ij} = 1$, $i \neq j$).

На рисунке 1 приведен интерфейс СЛ в виде случайной сети Эрдеша–Реньи (рис. 1а), а также безмасштабной сети (рис. 1б), смоделированных численно с помощью библиотеки Python NetworkX, соответственно. Последовательности точек и аппроксимирующие их кривые на рис. 1с представляют функции распределения степеней узлов этих сетей в двойном логарифмическом масштабе. А именно, кривые удовлетворяют пуассоновскому ($p_k = \frac{1}{k!} \langle k \rangle^k e^{-\langle k \rangle}$) и степенному ($p_k \propto k^{-\eta}$) законам распределения; $\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_j k_j = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \tau_{ij}$ – средняя степень узлов. Параметры моделирования подобраны таким обра-

зом, чтобы оба графа на рис. 1 имели схожие статистические характеристики. В частности, $\langle k \rangle = 4.04$, $\zeta = 4.88$ для случайной сети, где $\zeta \equiv \sum_i k_i^2 / N \langle k \rangle$ определяет нормированный второй момент степеней узлов. Степень η для безмасштабной сети, а также ее статистические свойства можно оценить в континуальном приближении, воспользовавшись подходами, изложенными в [9]; полагая $k_{\max} = k_{\min} N^{\frac{1}{\eta-1}}$ получаем $\eta \simeq 2.82$, в результате чего имеем $\langle k \rangle = 3.9$, $\zeta = 6.1$, соответственно. Заметим, что безмасштабная сеть обладает хабами – узлами наибольшей связности, присутствующими в виде четырех синих точек для функции распределения в правом нижнем углу на рис. 1с.

В работе мы используем подход Гейзенберга–Ланжевена в приближении среднего поля, который с учетом (1) приводит к системе уравнений типа Максвелла–Блоха:

$$\dot{\mathcal{E}}_i = (-i\omega_{ph,i} - \kappa_i) \mathcal{E}_i - ig \bar{P}_i + iJ \sum_j \tau_{ij} \mathcal{E}_j; \quad (2a)$$

$$\dot{\bar{P}}_i = (-i\omega_0 - \Gamma) \bar{P}_i + ig \sigma_i^z \mathcal{E}_i; \quad (2b)$$

$$\dot{\sigma}_i^z = (\gamma_P - \gamma_D) - (\gamma_P + \gamma_D) \sigma_i^z + 2ig(\mathcal{E}_i^* \bar{P}_i - \mathcal{E}_i \bar{P}_i^*), \quad (2c)$$

где $\mathcal{E}_i = \langle \hat{f}_i \rangle$, $\bar{P}_i = \langle \hat{\sigma}_i^- \rangle$, $\sigma_i^z = \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$ – средние значения соответствующих операторных величин; Γ – скорость затухания поляризации, которую считаем одинаковой для всех ДУС, κ_i – скорость потерь фотонов в i -м МР, γ_P – скорость накачки, γ_D – скорость затухания инверсии. Далее, уберем “быстрые” колебания и рассмотрим стационарные состояния систе-

мы на частоте ω , положив в (2) $\bar{P}_i(t) = P_i e^{-i\omega_0 t - i\omega t}$, $\mathcal{E}_i(t) = E_i e^{-i\omega_0 t - i\omega t}$, откуда имеем:

$$(\omega - \Delta_i + i\kappa_i)E_i - gP_i + J \sum_{j=1}^N \tau_{ij} E_j = 0; \quad (3a)$$

$$(i\Gamma + \omega)P_i + g\sigma_i^z E_i = 0, \quad (3b)$$

где $\Delta_i = \omega_{ph,i} - \omega_0$ – отстройка от резонанса для i -го МР, величину которой полагаем относительно небольшой, т.е. $|\Delta_i| < g$ для всех $i = 1, \dots, N$. При этом среднюю инверсию населенностей в (2с) считаем заданной, так что $\dot{\sigma}_i^z = 0$ и $\sigma_i^z \simeq \frac{\gamma_P - \gamma_D}{\gamma_P + \gamma_D}$, ср. с [6].

Физически значение $\omega = 0$ в (3) означает эволюцию как (среднего) поля, так и поляризации на частоте ω_0 , соответствующей частоте перехода ДУС.

Разрешая уравнение (3b) относительно поляризации P_i и подставив его в (3a), получаем уравнение для комплексной амплитуды поля E_i i -го МР в виде:

$$\{(\omega - \Delta_i + i\kappa_i)\omega_\Gamma + \sigma^z\} E_i + J\omega_\Gamma \sum_{j=1}^N \tau_{ij} E_j = 0, \quad (4)$$

где $\omega_\Gamma \equiv \omega + i\Gamma$; параметры ω , Δ_i , κ_i , Γ , J нормированы на g .

Проанализируем важный предельный случай (4), допуская i -й МР изолированным от остальной сетевой структуры. Тогда, полагая в (4) $\tau_{ij} = 0$, приходим к выражениям

$$\omega_{1,2} = -i\chi_{+,i} + \frac{1}{2} \left(\Delta_i \pm \sqrt{(\Delta_i - 2i\chi_{-,i})^2 - 4\sigma^z} \right), \quad (5)$$

определяющим характерные высоко- (ω_1) и низкочастотные (ω_2) элементарные колебания соответственно; $\chi_{\pm,i} \equiv (\kappa_i \pm \Gamma)/2$. Заметим, что физически отрицательная мнимая часть частоты ($\text{Im}[\omega] < 0$) в (5) отвечает за диссипацию энергии в системе, в то время как при $\text{Im}[\omega] > 0$ происходит усиление, обусловленное инверсией. А именно, в безинверсном случае, т.е. при $\sigma^z \simeq -1$, характерные частоты $\omega_{1,2}$ соответствуют обычным поляритонам верхней и нижней дисперсионных ветвей [13]. В пределе максимальной инверсии $\sigma^z \simeq 1$ образуются поляритоны Рамановского типа, соответствующие усилению излучения в среде [14]. Далее нас интересуют условия перехода рассматриваемой системы МР к лазерной генерации, когда $0 \leq \sigma^z \leq 1$. Для численных расчетов удобно использовать исходную систему (3), полагая, что отстройка Δ_i , а также κ_i для произвольной i -й моды СЛ есть случайные величины, равномерно распределенные в некоторых промежутках, ср. с [6].

На рисунке 2 представлены зависимости мнимых частей собственных частот СЛ от вещественных значений этих же частот, находящиеся несколько ниже порога генерации, определяемого условием $\text{Im}[\omega] = 0$, и соответствующие графам на рис. 1. Как и ожидалось, формируются две области решений, соответствующие характерным частотам $\omega_{1,2}$. Численные значения нормированных на g параметров κ_i , Γ для зависимостей на рис. 2 и ниже в статье выбраны таким образом, чтобы выполнялось (хотя, и на “пределе”) условие сильной связи между каждым ДУС и полем, $\kappa_i, \Gamma < 1$, ср. с [10].

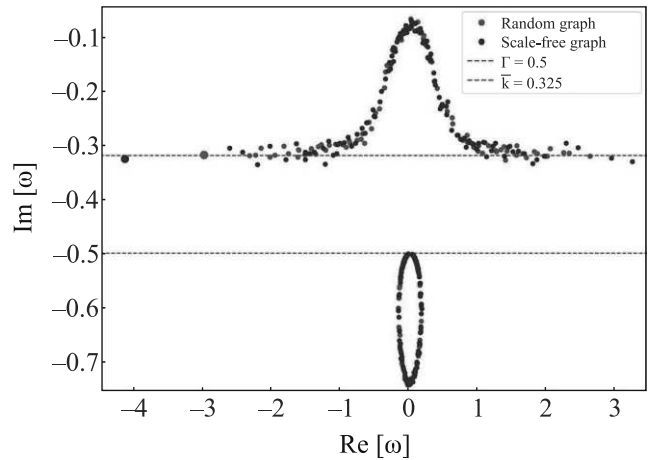


Рис. 2. (Цветной онлайн) Положение собственных частот СЛ на комплексно-вещественной плоскости для ω , соответствующих случайной (красный цвет) и безмасштабной (синий цвет) сетям, приведенным на рис. 1 при $\sigma^z = 0.1$, $\Gamma = 0.5$, $J = 0.6$. Параметры Δ_i и κ_i – случайные величины, принимающие с равной вероятностью значения в интервалах $[-0.5, 0.5]$ и $[0.5\Gamma, 0.8\Gamma]$ соответственно

Вясним закономерности группирования точек на рис. 2. Поскольку оба графа на рис. 1 имеют близкие статистические характеристики, выражаемые величинами $\langle k \rangle$ и ζ , то и условные “огibaющие” приведенных на рис. 2 дискретных зависимостей достаточно близки между собой. Принципиальной особенностью спектра собственных частот является наличие изолированного (максимального по величине) собственного значения Перрона, СЗП (Perron eigenvalue) – крайние (слева) жирные точки для каждого из графов на рис. 2. Это связано непосредственно со свойствами спектра матрицы смежности τ_{ij} для сложных сетей, для которых СЗП заключено в интервале значений $[\langle k \rangle, k_{\max}]$, см. например, [15]. На рисунке 1a и 1b СЗП соответствуют светло-желтые узлы, находящиеся приблизительно в центре графов. В частности, теорема Перрона–Фробениуса

гарантирует (для τ_{ij}) существование невырожденно-го положительного максимального СЗП с полностью положительными элементами собственного вектора; поскольку в (1) τ_{ij} присутствует с отрицательным знаком, то и соответствующие СЗП находятся в отрицательной области собственных частот на рис. 2.

Заметим, что СЗП вовсе не обязано соответствовать хабу, т.е. узлу, обладающему максимальной связностью. СЗП характеризует узел максимального влияния, определяемый по критерию собственных векторов (*eigenvector centrality*) [16]. Например, случайные сети не обладают хабами вовсе, но узел максимального влияния для них существует – светложелтая точка на рис. 1а. Физически существование таких узлов связано с наличием ненулевого усредненного (по узлам сети) поля $\bar{E}$:

$$\bar{E} = \frac{1}{N\langle k \rangle} \sum_{j=1}^N k_j E_j, \quad (6)$$

где $k_j = \sum_i \tau_{ij}$ есть степень j -го узла.

Для исследования СЗП воспользуемся аппроксимацией отоженной сети для матрицы смежности в виде $\tau_{ij} = \frac{k_i k_j}{N\langle k \rangle}$ (ср. с [7, 9]), и подставим ее в (4). Разрешив полученное уравнение относительно E_i , получим

$$E_i = -\frac{J(\omega_P + i\Gamma)k_i \bar{E}}{\{(\omega_P - \Delta_i + i\bar{\kappa})(\omega_P + i\Gamma) + \sigma^z\}}, \quad (7)$$

где $\bar{\kappa}$ – определяет средний уровень потерь фотонов в заданном интервале значений κ_i , ω_P – СЗП для частоты. Выражение (7) означает, что поле в i -м узле, соответствующем СЗП, полностью определяется средним полем $\bar{E}$, создаваемым сетевой структурой. Подставляя (7) в (6) для ω_P , получим:

$$\text{Re}[\omega_{P,1}] \simeq -J\zeta, \quad \text{Im}[\omega_{P,1}] \simeq -\bar{\kappa}, \quad (8a)$$

$$\text{Re}[\omega_{P,2}] = 0, \quad \text{Im}[\omega_{P,2}] = -\Gamma, \quad (8b)$$

где мы опустили отстройку Δ_j в случае ее малости по сравнению с величиной $J\zeta$, а также для простоты рассмотрели случай $\sigma^z \simeq 0$. Результаты (8) согласуются с численным моделированием, см. рис. 2: $\text{Im}[\omega_{P,1}]$ соответствует розовой пунктирной линии. При этом характерная частота в нижней области $\omega_{P,1}$ остается мнимой: $\text{Im}[\omega_{P,2}]$ соответствует зеленой линии на рис. 2, что физически означает быструю диссипацию низкочастотных возмущений в присутствии высокочастотных колебаний на частоте СЗП $\text{Re}[\omega_{P,1}]$. Заметим, что поскольку параметр ζ для безмасштабной сети больше (по абсолютной величине), чем для случайной (ср. с [7]), то СЗП в первом случае (синяя жирная точка) находится левее СЗП для случайной сети – красная жирная точка на рис. 2.

Рассмотрим теперь точки на рис. 2, которые располагаются вдоль среднего уровня потерь фотонов $\text{Im}[\omega] = -\bar{\kappa}$, и для которых $E_i \simeq E_j$. Данное допущение оправдано опять же в виду свойств матрицы смежности, обладающей относительно большим по величине СЗП, и меньшими остальными собственными значениями, см. [15]. В эту группу попадают как точки, которые обладают существенным влиянием, так и хабы, которые имеются в безмасштабной сети, см. рис. 1b. В результате, с помощью (4) для характерных частот имеем:

$$\omega_{1,2} = -i\chi_{\pm} + \frac{1}{2} \left(\delta_i \pm \sqrt{(\delta_i - 2i\chi_{\pm})^2 - 4\sigma^z} \right), \quad (9)$$

где введены обозначения $\chi_{\pm} \equiv (\bar{\kappa} \pm \Gamma)/2$, $\delta_i \equiv \Delta_i - Jk_i$ – отстройка от резонанса, учитывающая также степень i -го узла k_i . Далее, анализ рассматриваемых точек удобно провести в пределе $|\delta_i| \simeq \simeq Jk_i \gg \sqrt{(\kappa_i - \Gamma)^2 + 4\sigma^z}$, т.е. в предположении, что величина Jk_i достаточно велика. Тогда из (9) имеем (ср. с (8))

$$\text{Re}[\omega_1] \simeq -Jk_i + \frac{\sigma^z}{Jk_i}, \quad \text{Im}[\omega_1] \simeq -\bar{\kappa}, \quad (10a)$$

$$\text{Re}[\omega_2] \simeq -\frac{\sigma^z}{Jk_i}, \quad \text{Im}[\omega_2] \simeq -\Gamma, \quad (10b)$$

что хорошо совпадает с численным расчетом на рис. 2. При этом разброс положительных значений собственных частот вдоль оси абсцисс больше у безмасштабной сети, поскольку крайние (справа) синие точки соответствуют хамам.

Рассмотрим теперь точки на рис. 2, расположенные в относительно узкой (вертикальной) полосе значений $-1 < \text{Re}[\omega] < 1$. Это – две группы точек, плотно располагающихся в верхней и нижней части рис. 2, и соответствующих основному массиву СЗ системы (3), составляющих также основу СЗ матрицы смежности τ_{ij} , ср. с [15]. Принципиальным их поведением является тот факт, что собственные значения, соответствующие этим точкам, могут “притягиваться” друг к другу, что связано со свойством неэрмитовости (случайной) матрицы, соответствующей системе (3), ср. с [17]. Точнее говоря, здесь речь идет о неэрмитовой локализации излучения, которая существенно отличается от (эрмитовой) андреевской локализации, проявляющейся в статистических свойствах спектральных характеристик, см., например, [18]. Такая (неэрмитовая) локализация существенно влияет на статистику спектральных линий; в эксперименте со СЛ продемонстрировано отклонение этой статистики от распределения Вигнера

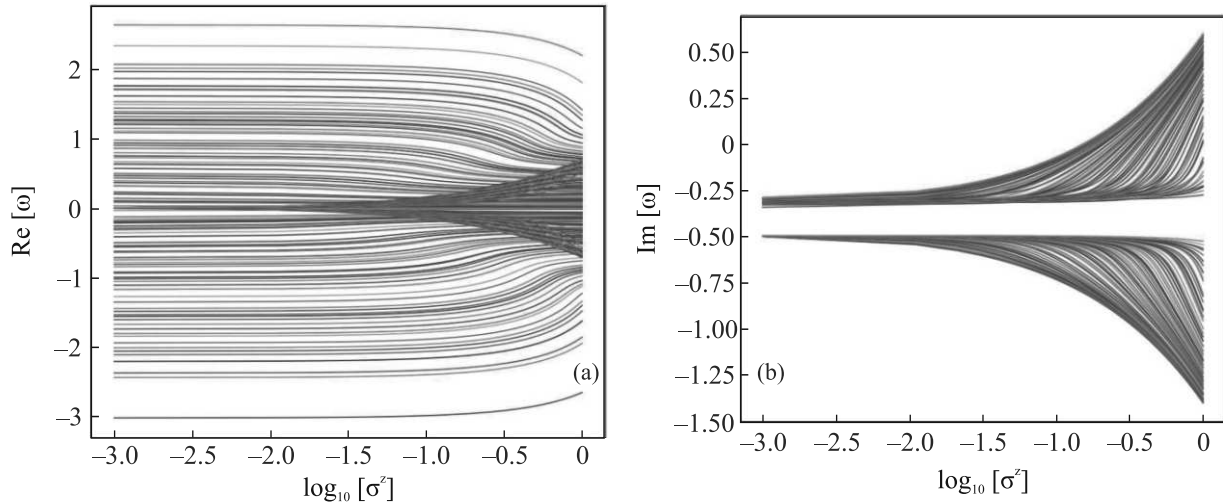


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость (а) – действительной $\text{Re}[\omega]$ и (б) – мнимой, $\text{Im}[\omega]$, частей собственных частот СЛ, представляющего собой случайный граф, как функции десятичного логарифма разности населенностей σ^z . Остальные параметры те же, что и на рис. 2

расстояний между уровнями, характерного физике андерсоновской локализации, см. [4, 19].

Моды, описывающие точки из верхней области на рис. 2, первыми стремятся попасть в полуплоскость, где имеется лазерное усиление, т.е. $\text{Im}[\omega] > 0$. Их “мобильность” обусловлена тем, что топологически такие точки соответствуют узлам с небольшим числом связей, или наименее значимым узлам, расположенным преимущественно на периферии графов, см. рис. 1, что также подтверждается экспериментальными результатами, полученными для лазерной генерации СЛ на графах [4].

Для нахождения характерных частот точек, группирующихся возле значения $\omega = 0$, можно воспользоваться выражениями (9), полагая при этом малой величину $\delta_i \simeq \Delta_i - Jk_{\min}$, где $k_{\min}$ – минимальное значение степеней узлов в графе. Численное моделирование показывает, что лазерная генерация возникает, когда точки вверху рис. 2 выходят в полуплоскость вещественных собственных значений, что определяется условием

$$\sigma^z \simeq \bar{\kappa}\Gamma + \frac{\delta_i^2}{4}. \quad (11)$$

Если при этом выполняются неравенства $|\delta_i|\chi_-$, δ_i^2 , $\chi_-^2 \ll 1$, то с помощью (9), (11) получаем

$$\text{Re}[\omega_{1,2}] \simeq \frac{\delta_i}{2}, \quad \text{Im}[\omega_1] = 0, \quad \text{Im}[\omega_2] \simeq -2\chi_+, \quad (12)$$

т.е. частота ω_1 становится вещественной. Заметим, что последним слагаемым (11) в этом пределе можно пренебречь, и тогда условие лазерной генерации при-

обретает весьма универсальный для лазерной физики вид, ср. с [20].

На рисунке 3 представлены зависимости $\text{Re}[\omega]$ и $\text{Im}[\omega]$ для СЛ, как функции от логарифма инверсии населенностей σ^z . Из рисунка 3а видно, что точки, расположенные в пределах полосы значений $-1 < \text{Re}[\omega] < 1$ с увеличением инверсии σ^z приходят в “движение”. Собственные частоты, соответствующие этой группе точек на рис. 3а, движутся навстречу друг другу, что характеризует эффект затягивания частоты лазерной генерации к частоте перехода в ДУС ω_0 (в этом случае $\omega \simeq 0$), ср. с [6].

С другой стороны, из рис. 3а следует, что нижняя (синяя) линия, соответствующая частоте СЗП $\text{Re}[\omega_{P,1}]$ мало меняется с ростом σ^z . Схожим образом ведут себя голубая и желтая линии в верхней части рис. 3а, соответствующие крайним точкам справа на рис. 2, и узлам, обладающим существенным влиянием в случайной сети, после СЗП, ср. рис. 1а. Таким образом, МР, находящиеся в узлах наибольшего влияния, остаются как бы топологически защищенными, и в процессе затягивания частоты практически не участвуют; мнимая часть соответствующих собственных частот в область усиления $\text{Im}[\omega] > 0$ так и не переходит, см. рис. 3б.

Асимптотическое поведение кривых на рис. 3б при преодолении порога генерации может быть пояснено следующим образом. Пусть система ДУС полностью инвертирована, т.е. $\sigma^z \simeq 1$. В этом случае в (9), если положить $|\delta_i^2 - 4\chi_-^2| \ll 4$, то вещественная комбинация параметров окажется $\delta_i^2 - 4 - 4\chi_-^2 < 0$. Выделив в выражении (9) комплексную и веществен-

ные части (см., например, [13]), в этом пределе можно найти $\text{Im}[\omega_1] = 1 - \chi_+ \simeq 0.59$ и $\text{Im}[\omega_2] = -(1 + \chi_+) \simeq -1.41$, что хорошо согласуется с максимальным и минимальным значениями крайних кривых на рис. 3b при $\log[\sigma^z] = 0$ соответственно.

Для безмасштабной сети (рис. 1a) характерные зависимости вещественной и мнимой частей частоты ω от разности населенностей имеют схожий с рис. 3 вид. Существенные отклонения этих зависимостей возникают, когда распределение степеней узлов происходит по степенному закону $p_k \propto k^{-\eta}$ в области $1 < \eta < 2.5$, ср. с [7]. Для такой сети роль хабов сильно возрастает, что отражается на их спектральных характеристиках: они начинают конкурировать с СЗП за “влияние” в сети. В этом случае, как показывает численный расчет, имеет смысл учитывать корреляции между узлами сети более высокого порядка, чем ζ , ср. с (8a). Анализ данного предела нами будет проведен отдельно.

Наконец, в контексте физики СЛ следует обратить внимание на поведение эффективного объема мод, определяемого как (ср. с [6])

$$V_j = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\max_i [|E_{i,j}|^2]} |E_{i,j}|^2, \quad (13)$$

где $E_{i,j}$ – амплитуда поля в i -м резонаторе для j -го собственного вектора системы (3).

Влияние статистических свойств случайной сети на свойства локализации состояний в рассматриваемой задаче показано на рис. 4. А именно, здесь приведена усредненная по большому числу реализаций случайных графов, зависимость среднего объема V , занимающего j -й модой СЛ, от вероятности $\mathbf{p} = p_{ij}$, с которой соединена каждая пара из N узлов. Средняя степень узлов в этом случае есть просто $\langle k \rangle = \mathbf{p}(N - 1) \simeq \mathbf{p}N$ [9]. Зависимость на рис. 4 рассчитана, начиная со значения $\mathbf{p} = 0.1$, соответствующего $\langle k \rangle \simeq 1$.

В области $0 < \langle k \rangle < 1$ случайная сеть состоит из отдельных, мало связанных друг с другом микрорезонаторов, что приводит к чрезмерным (расчетным) флуктуациям среднего объема мод, минимальное значение которого (согласно определению (13)) равно единице при полной локализации произвольной j -й моды.

С увеличением $\mathbf{p}$ (что означает рост $\langle k \rangle$) степень связности случайного графа увеличивается. Значение $\mathbf{p} = 0.1$ на рис. 4 соответствует величине $\langle k \rangle \simeq 10$, при которой у графа уже имеется гигантская (связанная) компонента. Таким образом, увеличение среднего объема с ростом средней степени узлов $\langle k \rangle$

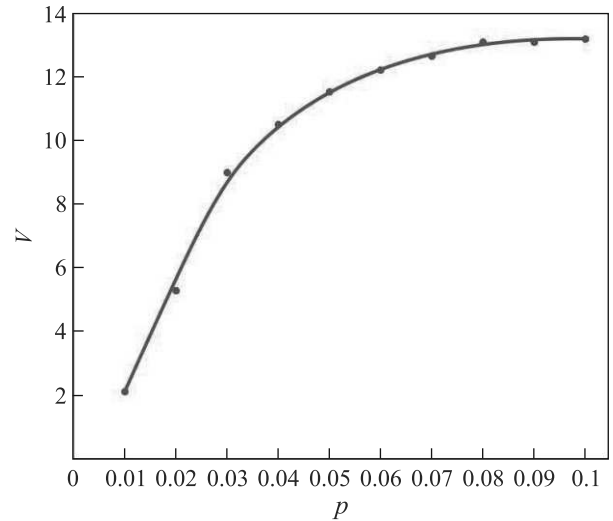


Рис. 4. (Цветной онлайн) Усредненная по большому числу реализаций случайных графов зависимость среднего объема мод V СЛ от вероятности $\mathbf{p}$ (точкам соответствуют численно полученные зависимости, а сплошная линия – результат их аппроксимации). Остальные параметры те же, что и на рис. 2

свидетельствует об эффекте перехода от локализованных состояний (при $\langle k \rangle < 1$) к делокализации излучения, присущего случайному графу с гигантской компонентой связности. Выход соответствующей кривой на насыщение связан с исчезновением изолированных узлов в случайном графе, что происходит в пределе $\langle k \rangle \gg 1$, см. рис. 4.

Заметим, что, как показывает численный расчет, поведение среднего объема мод V (т.е. проявление эффекта локализации/делокализации излучения) для рассматриваемого в работе СЛ в зависимости от других материальных параметров СЛ (например, инверсии населенностей), может отличаться от “обычных” СЛ, демонстрирующих (почти экспоненциально) делокализацию излучения в своей структуре [6]. В нашем случае этот эффект зависит не только от статистических свойств графа (матрицы смежности), но и от характерных параметров декогерентности, диссипации и отстройки от резонанса, ср. с [17]. В общем случае, для различных комбинаций этих параметров изучение эффекта локализации/делокализации излучения представляется весьма интересной и не тривиальной (по крайней мере, в теории) задачей, которая будет нами проанализирована отдельно.

В заключение, в работе исследована модель связанных микрорезонаторов, содержащих ДУС, и расположенные в узлах комплексной (случайной, или безмасштабной) сети, ребрами которой являются све-

топроводящие каналы, связывающие между собой эти микрорезонаторы. Рассматриваемая система демонстрирует основные свойства случайных лазеров, заключающиеся как в локализации, так и в делокализации светового излучения в зависимости от статистических свойств сетевой структуры. В этом аспекте предложенная модель случайного лазера качественно согласуется с недавними экспериментами, выполненными со СЛ, образованным случайной сетью нановолокон. Вместе с тем, рассмотренная нами модель лазера демонстрирует довольно интересные спектральные свойства, заключающиеся в наличии максимального по величине (уединенного) собственного значения Перрона для частоты. Эти свойства связаны с неодинаковостью вклада различных узлов графа (статистических свойств степеней узлов) в процесс лазерной генерации. В последующих публикациях мы собираемся исследовать данные вопросы для более широкого диапазона изменения материальных параметров лазера, чем те, которые были представлены в работе.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 23-22-00058 “Когерентные эффекты в двухмерных квантовых материалах с интерфейсом сложных сетей”.

1. D. Wiersma and S. Diederik, *Nature Phys.* **4**, 359 (2008).
2. В.С. Летохов, *ЖЭТФ* **53**, 1442 (1967).
3. C. Hui, Y. Xu Junying, L. Yong, A.L. Burin, E.W. Seeling, X. Liu, and R.P.H. Chang, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **9**, 111 (2003).
4. M. Gaio, D. Saxena, J. Bertolotti, D. Pisignano, A. Camposeo, and R. Sapienza, *Nat. Commun.* **10**, 226 (2019).
5. L. Sapienza, H. Thyrestrup, S. Stobbe, P.D. Garcia, S. Smolka, and P. Lodahl, *Science* **327**, 1352 (2010).
6. Ю.В. Юанов, А.А. Зябловский, Е.С. Андриянов, И.В. Доронин, А.А. Пухов, А.П. Виноградов, А.А. Лисянский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 725 (2020).
7. А.Ю. Баженов, М.М. Никитина, А.П. Алоджант, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 685 (2022).
8. A.P. Alodjants, A.Yu. Bazhenov, A.Y. Khrennikov, and A.V. Bukhanovsky, *Sci. Rep.* **12**, 8566 (2022).
9. A.-L. Barabási, *Network Science*, Cambridge University Press (2016).
10. A. Dousse, J. Suffczyński, R. Braive, A. Miard, A. Lemaître, I. Sagnes, L. Lanco, J. Bloch, P. Voisin, and P. Senellart, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 121102 (2009).
11. I.-H. Chen, Y.Y. Lin, Y.-C. Lai, E.S. Sedov, A.P. Alodjants, S.M. Arakelian, and R.-K. Lee, *Phys. Rev. A* **86**, 023829 (2012).
12. A. Halu, S. Garnerone, A. Vezzani, and G. Bianconi, *Phys. Rev. E* **87**, 022104 (2013).
13. S. Pau, G. Björk, J. Jacobson, Hui Cao, Y. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **51**, 14437 (1995).
14. A.Y. Bazhenov, D.V. Tsarev, and A.P. Alodjants, *Physica B: Condensed Matter*. **579**, 411879 (2020).
15. C. Sarkar and S. Jalan, *Chaos* **28**, 102101 (2018).
16. M.E.J. Newman, *Mathematics of Networks*, in *The New Palgrave Dictionary of Economics*, Palgrave Macmillan, London (2018), p. 8525.
17. J. Feinberg and A. Zee, *Phys. Rev. E* **59**, 6433 (1999).
18. M. Sade, T. Kalisky, S. Havlin, and R. Berkovits, *Phys. Rev. E* **72**, 066123 (2005).
19. Г.М. Заславский, *УФН* **129**, 211 (1979).
20. Г. Хакен, *Лазерная светодинамика*, Мир, М. (1988).

Построение структуры одномерного фотонного кристалла по заданному спектру коэффициента отражения

П. С. Емельянцев⁺¹⁾, Н. И. Пышков⁺¹⁾, С. Е. Свяховский⁺¹⁾

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

Поступила в редакцию 25 апреля 2023 г.

После переработки 1 мая 2023 г.

Принята к публикации 2 мая 2023 г.

Предложен и экспериментально реализован метод решения обратной задачи проектирования структуры одномерного фотонного кристалла. Известно, что одномерный фотонный кристалл, показатель преломления которого модулирован в виде синусоиды, имеет узкую фотонную запрещенную зону на частоте, однозначно связанной с пространственной частотой этой синусоиды. Мы предлагаем метод обратного проектирования одномерных фотонных кристаллов с произвольным заданным спектром отражения путем разложения этого спектра по элементарным фотонным запрещенным зонам и последующего их суммирования. В работе показано применение этого метода для изготовления примеров фотонных кристаллов с простыми формами спектральных кривых отражения.

DOI: 10.31857/S1234567823110058, EDN: djmrkd

Введение. Интерес к структурам с периодически меняющимся показателем преломления берет свое начало с работ Яблоновича [1] и Джона [2], в которых впервые было показано, что с помощью этих структур можно эффективно управлять распространением света аналогично тому, как полупроводники изменяют свойства электронов в физике твердого тела. Фотонные кристаллы (ФК) – твердотельные структуры, в которых показатель преломления пространственно модулирован с периодом порядка длины волны. Такое устройство структуры ФК ведет к возникновению фотонных запрещенных зон (ФЗЗ), областей частот, в которых распространение света внутри ФК невозможно. Наличие ФЗЗ делает возможным возникновение некоторых интересных оптических эффектов, таких как усиление Рамановского рассеяния [3], эффект Парселла [4], генерация второй и третьей оптической гармоники [5, 6] и других. ФК обладают исключительной гибкостью в возможностях управления потоком света, достигаемой посредством использования широкого числа конструктивных степеней свободы этих структур. Благодаря этой гибкости становится возможным реализация компактных и высокоэффективных логических устройств на основе фотонных структур, что критически важно для дальнейшего развития фотонных и оптоэлектронных технологий. В этом случае возникает проблема обратного проектирования ФК с

заданными оптическими характеристиками, которая решалась различными способами, от методов математической оптимизации до применения самообучающихся алгоритмов.

Существующие методы обратного проектирования ФК. В работе [7] используется градиентная оптимизация – возможно наиболее популярная техника обратного проектирования фотонных структур [8, 9]. Задача оптимизации заключается в нахождении экстремумов целевой функции в некоторой области конечномерного векторного пространства. В данном случае аргументами такой функции являются настраиваемые параметры фотонного устройства – показатели преломления и толщины слоев. В рамках каждой итерации вычисляется градиент целевой функции по настраиваемым параметрам, а затем эти параметры меняются вдоль направления градиента для улучшения производительности фотонного устройства. Авторы работы [7] использовали метод градиентной оптимизации для улучшения добротности фотоннокристаллического резонатора малого объема более чем на два порядка. Также метод градиентной оптимизации может применяться и для обратного проектирования оптических [10] и акустических [11] метаматериалов. Для обратного проектирования ФК используются такие методы оптимизации, как например, оптимизация на основе математической инверсии [12] или так называемая выпуклая оптимизация [13], которая в работе [14] была использована для создания компактного оптического демультиплексора.

¹⁾ e-mail: emelyantsev97@mail.ru; kolyagod12@gmail.com; sse@shg.ru

Большая часть существующих работ в области решения задачи обратного проектирования фотонных структур в той или иной степени включает в себя использование машинного обучения, нейронных сетей (НС) и других подобных алгоритмов [15–18]. В работе [19] описывается метод, совмещающий классические алгоритмы оптимизации и НС для обратного проектирования ФК. Имея возможность изучать функции из обучающего набора данных, нейронные сети могут выполнять как прямое прогнозирование, так и обратное проектирование различных фотонных структур. Объединение традиционных методов обратного проектирования и оптимизации с НС позволяет еще больше повысить эффективность, гибкость и возможности моделей. Помимо НС, в настоящее время в различных областях науки и производства набирают популярность алгоритмы машинного обучения. Основным их отличием от НС является то, что они требуют вмешательства человека в процессе их обучения, а также то, что они нацелены на более простые задачи и умеют работать только со структурированным набором данных. В работах [20–23] показано успешное применение алгоритмов машинного обучения для обратного проектирования различных фотонных структур. Стоит также отметить возможность применения генетических алгоритмов [24] для обратного проектирования ФК.

Однако вышеприведенные методы не являются регулярными, в каждом конкретном случае существование и единственность решения не очевидны.

В этой работе мы предлагаем метод решения обратной задачи восстановления структур одномерных фотонных кристаллов (ФК) по спектру отражения. Рассматриваемый метод позволяет получить структуру ФК с произвольным заданным спектром отражения, что открывает огромный простор для возможных применений. Произведены численные расчеты нескольких структур ФК для различных заданных спектров отражения, были изготовлены опытные образцы одномерных ФК.

Прямая задача: расчет спектра коэффициента отражения. Вначале укажем использованное нами решение прямой задачи построения спектра ФК по известной структуре. Для этого используется метод матриц распространения [25]. Мы используем рекуррентный метод, который является переформулированным матричным методом и на практике отличается более быстрой скоростью счета. Метод основан на классическом способе суммирования многократно отраженных лучей. Используемый нами рекуррентный метод позволяет вычислить коэффициенты отражения и прохождения структуры, состоя-

щей из $m+1$ слоев, если эти коэффициенты известны для m слоев [26]. Пусть на слоистую структуру, показатели преломления и толщины которой для каждого m -го слоя равны соответственно n_m и d_m , под углом θ падает монохроматическая волна вида:

$$E(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r})e^{i\omega t}. \quad (1)$$

Далее рассмотрим только пространственное распространение волны вдоль x – нормального направления к поверхностям слоев, $E(\mathbf{r}) = E(x)$. Тогда поле в слое m представимо в виде:

$$E_m(x) = A_me^{ik_0\sigma_mx} + B_me^{-ik_0\sigma_mx}. \quad (2)$$

Здесь коэффициент $\sigma_m = (n_m^2 - \sin^2 \theta_m)^{1/2}$, $k_0 = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор падающей волны, θ_m – угол распространения преломленной волны к оси x . Волны с амплитудами A_m и B_m распространяются, соответственно, вдоль и противоположно оси x . Эти амплитуды могут быть получены из граничных условий для электрического и магнитного полей и из формул Френеля. Коэффициенты отражения от m -го и $(m+1)$ -го слоев, $r_{m+1} = \frac{B_m}{A_m}$ и $r_{m+1} = \frac{B_{m+1}}{A_{m+1}}$ связаны рекуррентным соотношением Паррета:

$$r_m = \frac{r_{m+1} + W_m}{1 + r_{m+1}W_m} e^{2ik_0\sigma_md_m}. \quad (3)$$

Данное выражение было получено с учетом непрерывности x -компонент волновых векторов на границе раздела m -го и $(m+1)$ -го слоев, а также граничные условия для s - и p -поляризации света. Здесь введено обозначение:

$$W_m = \frac{\sigma_m - \sigma_{m+1}P_m}{\sigma_m + \sigma_{m+1}P_m}, \quad (4)$$

где P_m – поляризационный фактор, равный $P_m = 1$ для S -поляризации и $P_m = (\frac{n_m}{n_{m+1}})^2$ для P -поляризации. Расчет по рекуррентной формуле Паррета начинается с последнего слоя, для которого $r_{m+1} = 0$. Коэффициент отражения для всей системы по интенсивности равен $R = r_0^2$.

Обратная задача: метод построения структуры ФК. Рассмотрим одномерный ФК суммарной оптической толщиной L , показатель преломления которого модулирован следующим образом:

$$n(x) = A \sin(k_0x + \phi) + B, \quad (5)$$

где x – оптический путь, $k_0 = \frac{4\pi}{\lambda_0}$ – волновое число, ϕ – начальная фаза. Выберем A и B таким образом, чтобы $n(x)$ менялся в фиксированных пределах от

n_1 до $n_2 > n_1$: $A = (n_2 - n_1)$, $B = n_1$. В этом примере значение ϕ не повлияет на результат, поэтому выберем $\phi = 0$. Получаем:

$$n(x) = (n_2 - n_1) \sin(k_0 x) + n_1. \quad (6)$$

ФК с такой модуляцией показателя преломления имеет очень узкую ФЗЗ на длине волны λ_0 . Для вычисления спектра коэффициента отражения этой структуры приблизим непрерывную зависимость (6) кусочно-постоянной, т.е. разделим кристалл на слои оптической толщиной $\delta l \ll \lambda_0$. Координата границы каждого m -го слоя $x_m = m \cdot \delta l$, его показатель преломления $n_m = n(x_m)$. Физическая толщина слоев определяется как $d_m = \delta l / n_m$. Приемлемость аппроксимации непрерывной функции $n(x)$ кусочно-постоянной обсуждается в [27]. Результат вычисления показан на рис. 1. На вставке показана кусочно-постоянная зависимость показателя преломления от толщины кристалла, использованная при расчете. В спектре действительно присутствует узкая ФЗЗ на заданной длине волны.

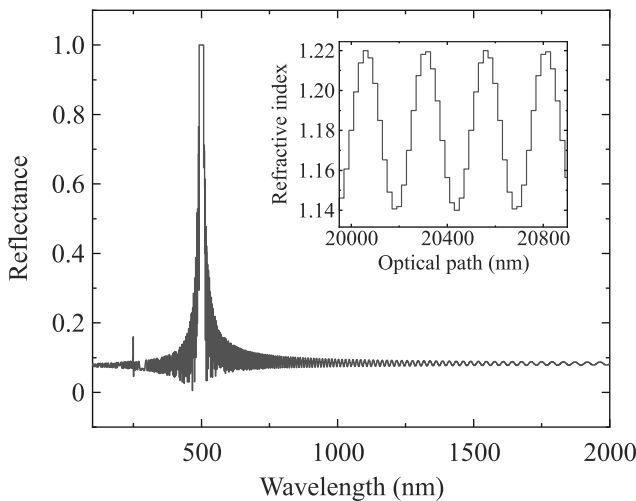


Рис. 1. (Цветной онлайн) Теоретически рассчитанный спектр отражения ФК с модуляцией показателя преломления (6) для s -поляризации. Результат получен для $L = 40$ мкм, оптическом пути каждого слоя $\delta l = 20$ нм, $n_1 = 1.14$, $n_2 = 1.22$, $\lambda_0 = 500$ нм. Вставка: зависимость показателя преломления от глубины фотонного кристалла, показан участок от 20.0 до 20.8 мкм

Это приводит нас к идее обратного проектирования одномерных ФК путем аппроксимации любого заданного спектра отражения этими узкими запрещенными зонами. Естественное ограничение, накладываемое на задаваемый спектр, состоит в том, что он не должен иметь слишком узких спектральных особенностей: спектральная ширина особенности не

должна быть меньше минимальной ширины запрещенной зоны.

Пусть $A(\lambda)$ – спектр отражения, для которого мы хотим подобрать соответствующую структуру одномерного ФК. Сделаем эту функцию дискретной: пусть этот спектр состоит из N точек $a_i(\lambda_i)$, $i \in [1, N]$. Пусть кристалл имеет M слоев, толщина m -ого слоя d_m , оптический путь на каждом m -ом слое равен $l_m = n_m d_m$, $x_m = \sum_{k=1}^m n_k d_k$ – оптический путь от поверхности ФК до начала $(m+1)$ -го слоя, $m \in [1, M]$. Показатель преломления меняется от n_1 до n_2 . Тогда, в соответствии с уравнением (6), получим выражение для показателя преломления m -го слоя:

$$n(x_m) = \Delta n \left[C_1 \sum_{i=1}^N a_i(\lambda_i) \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_i} x_m + \phi_i\right) + C_2 \right] + n_1. \quad (7)$$

Здесь C_1 , C_2 – нормировочные коэффициенты, которые выбраны таким образом, чтобы выражение в квадратных скобках попадало в интервал $[0, 1]$. $\Delta n = n_2 - n_1$. Так, например, пусть для каждого оптического расстояния x_m сумма N гармонических функций равна:

$$S_m = \sum_{i=1}^N a_i(\lambda_i) \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_i} x_m + \phi_i\right), \quad (8)$$

и $S_m^{\max}$, $S_m^{\min}$ – максимальное и минимальное значения S_m на протяжении всего кристалла соответственно, то $C_1 = \frac{1}{S_m^{\max} - S_m^{\min}}$, $C_2 = \frac{S_m^{\min}}{S_m^{\max} - S_m^{\min}}$. Остается вопрос выбора фазы ϕ_i . Для каждой i -ой гармонической функции фаза выбирается следующим образом: $\phi_i = 2\pi \frac{i}{N} \frac{L}{\lambda_m}$, где λ_m – средняя длина волны спектрального диапазона, в котором решается обратная задача. Такая зависимость была выбрана, чтобы равномерно распределить по толщине кристалла возникающие между близкими гармониками биения.

Примеры решения обратной задачи. Для использования описанного выше метода в случае каждого заданного спектра необходимо выбрать суммарную толщину кристалла L . Далее кристалл разбивается на $M = L/\delta l$ слоев, толщина каждого слоя δl много меньше длины волны света. В данной работе выбрана величина $\delta l = 20$ нм.

В качестве первого примера была смоделирована структура одномерного ФК, спектр отражения которого представляет собой треугольную функцию шириной от 470 до 710 нм с вершиной на 590 нм, значение функции в вершине 0.9 – такой выбор обусловлен тем, что функция отражения не может превосходить

1, и при этом единичное значение коэффициента отражения фотонного кристалла может быть получено слишком легко и тривиально. Суммарный оптический путь $L = 50000$ нм, количество слоев $M = 2500$, число гармонических функций $N = 256$. В качестве предельных значений показателей преломления слоев были выбраны $n_1 = 1.14$ и $n_2 = 1.22$. Сравнение задаваемого спектра отражения и спектра отражения, рассчитанного рекуррентным методом для данной структуры ФК, представлено на рис. 2а, а вид данной структуры показан на рис. 2б. Спектр достаточно близок к желаемому, имеются паразитные осцилляции, вызванные интерференцией Фабри–Перо на границах структуры.

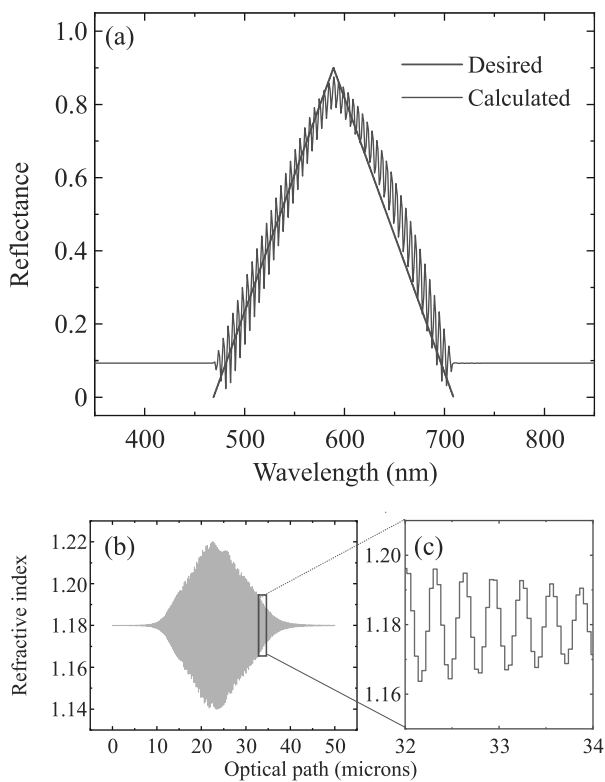


Рис. 2. (Цветной онлайн) Теоретические расчеты для фотонного кристалла со спектром отражения в виде треугольника: (а) – задаваемый спектр отражения и спектр отражения, рассчитанный с помощью рекуррентного метода; (б) – представление структуры данного кристалла как зависимость показателя преломления от оптического пути внутри кристалла; (с) – увеличенный участок от 32 до 34 мкм

Для выяснения значимости такого параметра, как толщина структуры, была смоделирована серия фотонных кристаллов с треугольной формой спектрального отклика. В пределах серии ставилось различное ограничение на суммарную оптическую толщину структуры L от 10 до 50 мкм. Результаты мо-

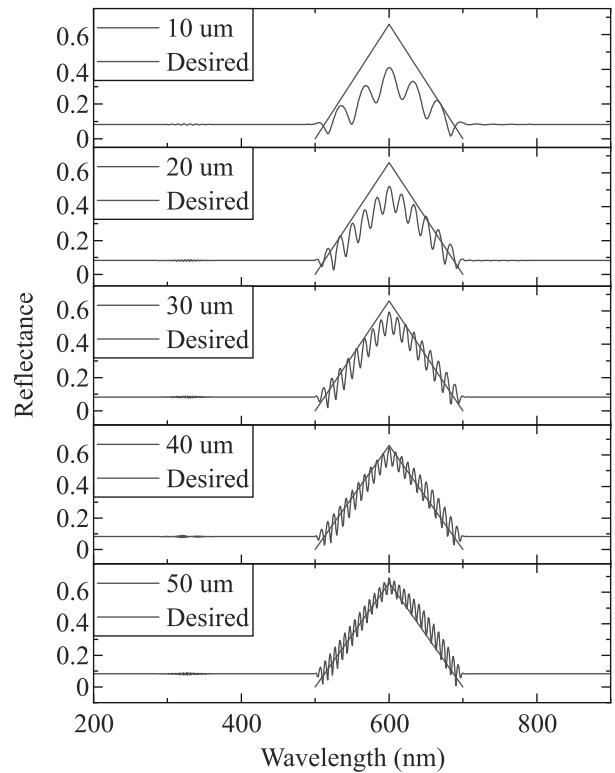


Рис. 3. (Цветной онлайн) Теоретический расчет фотонного кристалла с треугольным спектром отражения в сравнении с желаемым спектром для значений суммарной оптической толщины структуры L от 10 до 50 мкм

делирования представлены на рис. 3. Заметно, что при увеличении толщины структуры уменьшается амплитуда и увеличивается частота паразитных осцилляций, спектр постепенно приближается к желаемому. Отметим, что число гармонических функций, которые используются для приближения спектра, во всех случаях постоянно и равно $N = 256$, таким образом, их число не влияет на паразитные осцилляции. Отметим, что на длине волны 300 нм имеется незначительный артефакт – ФЗЗ второго порядка.

В качестве второго примера был смоделирован ФК со спектром отражения в виде параболы шириной от 580 до 820 нм с вершиной на 700 нм. Суммарный оптический путь $L = 250000$ нм, предельные значения показателя преломления те же, что и для ФК с треугольным спектром. Сравнение задаваемого и рассчитанного спектров представлено на рис. 4а, вид структуры ФК показан на рис. 4б. Теоретический спектр достаточно хорошо аппроксимирует заданный.

Изготовление экспериментальных образцов. Для экспериментальной проверки предлагаемого метода были изготовлены одномерные

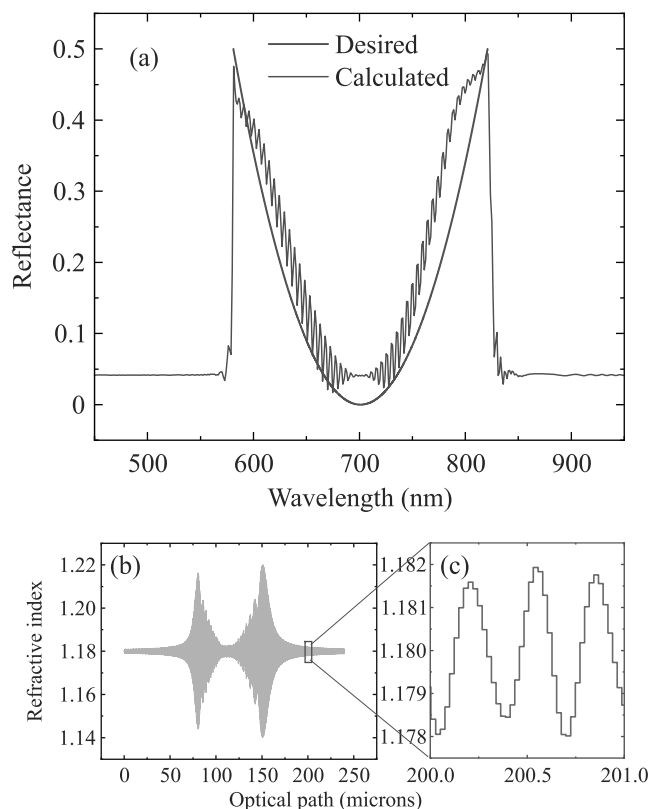


Рис. 4. (Цветной онлайн) Теоретические расчеты для фотонного кристалла со спектром отражения в виде параболы: (a) – задаваемый спектр отражения и спектр отражения, рассчитанный с помощью рекуррентного метода; (b) – представление структуры данного кристалла как зависимости показателя преломления от оптического пути внутри кристалла; (c) – увеличенный участок 200–201 мкм

фотоннокристаллические структуры и измерены их оптические спектры. В данной работе для изготовления одномерных ФК используется методика электрохимического травления кремния, описанная в [28]. Было показано, что при помощи данной методики можно изготавливать фотонные кристаллы с тысячами слоев, при этом оптические потери определяются главным образом рэлеевским рассеянием, не превосходят нескольких процентов для середины оптического диапазона даже для образцов толщиной 100 мкм и быстро падают с ростом длины волны.

В этой работе использовались следующие параметры процесса травления: сырьем является кристаллический кремний ориентации поверхности (100), удельным сопротивлением 0.005 Ом·см, минимальная и максимальная плотности токов $j_{\min} = 40 \text{ мА/см}^2$, $j_{\max} = 160 \text{ мА/см}^2$, в качестве электролита используется водно-спиртовой рас-

твор фтороводородной кислоты (HF) в массовой концентрации 28 %.

На основе полученных расчетов были изготовлены опытные образцы одномерных ФК, их модуляция показателя преломления соответствовала изображенным на рис. 2b и 4b. Параметры образцов (профиль $n(x)$ и толщина L) соответствовали расчетным. Измерение оптических спектров выполнялось по методике, описанной в [28]. Спектры отражения полученных образцов снимались с помощью лабораторного спектрометра OceanInsight QEPRO при нормальном падении. Источником света служила галогеновая лампа со спектральным диапазоном 400–1200 нм. Измеренные спектры отражения для обоих примеров представлены на рис. 5, 6.

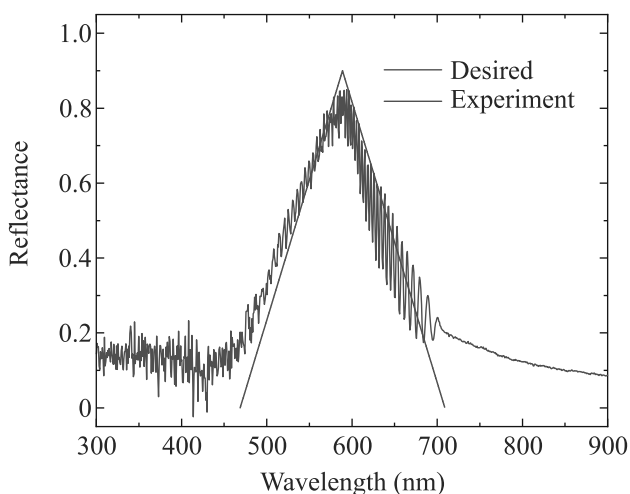


Рис. 5. (Цветной онлайн) Экспериментальный спектр коэффициента отражения ФК в сравнении с желаемой функцией спектрального отклика, имеющей форму треугольника

Как можно увидеть, экспериментальные спектры находятся в хорошем соответствии с изначально заданными спектрами, как по форме, так и по положению. Так же, как и на теоретических графиках, присутствуют паразитные осцилляции, амплитуда которых не превышает 10 % от величины полезного сигнала. Для случая параболического спектра на краях диапазона имеются уширения, связанные с конечной минимальной шириной запрещенной зоны ФК. Экспериментально полученная форма функции в заданной области соответствует заданной.

Заключение. Был продемонстрирован новый метод обратного проектирования одномерных ФК, позволяющий по заданной спектральной функции коэффициента отражения построить структуру ФК как зависимость показателя преломления от глуби-

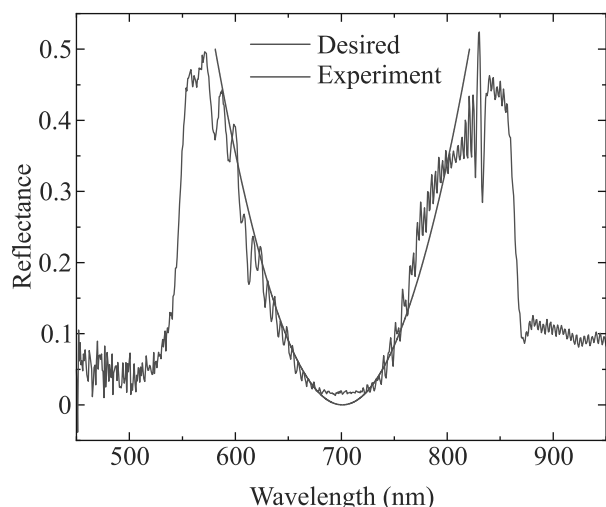


Рис. 6. (Цветной онлайн) Экспериментальный спектр коэффициента отражения ФК в сравнении с желаемой функцией спектрального отклика, имеющей форму параболы

ны структуры. Показаны примеры применения метода на спектральных функциях простой формы. Метод подтвержден экспериментально, образцы ФК были изготовлены при помощи электрохимического травления кремния. Рассматриваемый метод может быть пригоден для других методов изготовления, в которых имеется техническая возможность задавать произвольный пространственный профиль $n(x)$, например, электрохимическое травление алюминия, титана и двухфотонная фотополимеризация с градиентным изменением показателя преломления.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку этой работы Российским научным фондом, проект 21-72-10103, <https://rscf.ru/en/project/21-72-10103/>.

1. E. Yablonovitch. Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
2. S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
3. M. Ashurov, A. Baranchikov, and S. Klimonsky, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**(17), 9630 (2020).
4. S. Noda, M. Fujita, and T. Asano, Nat. Photonics **1**(8), 449 (2007).
5. J. Martorell, R. Vilaseca, and R. Corbalan, Appl. Phys. Lett. **70**(6), 702 (1997).
6. M. Martemyanov, E. Kim, T. Dolgova, A. Fedyanin, O. Aktsipetrov, and G. Marowsky, Phys. Rev. B **70**(7), 073311 (2004).

7. M. Minkov, I. A. D. Williamson, L. C. Andreani, D. Gerace, B. Lou, A. Y. Song, T. W. Hughes, and S. Fan, ACS Photonics **7**(7), 1729 (2020).
8. J. Jensen and O. Sigmund, Laser Photonics Rev. **5**, 308 (2011).
9. C. Lalau-Keraly, S. Bhargava, O. Miller, and E. Yablonovitch, Opt. Express **21**, 21693 (2013).
10. W. Chen, K. Diest, C.-Y. Kao, D. E. Marthaler, L. A. Sweatlock, and S. Osher, *Gradient Based Optimization Methods for Metamaterial Design*, Springer Netherlands, Dordrecht (2013), c. 175.
11. L. Fahey, F. Amirkulova, and A. Norris, J. Acoust. Soc. Am. **146**(4), 2830 (2019).
12. J. Geremia, J. Williams, and H. Mabuchi, Phys. Rev. E Statistical, nonlinear, and soft matter physics **66**, 066606 (2003).
13. S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*, Cambridge University Press, Cambridge (2004).
14. A. Y. Piggott, J. Lu, K. G. Lagoudakis, J. Petykiewicz, and T. M. Babinec, Nat. Photonics **9**(6), 374 (2015).
15. Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, Nature **521**, 436 (2015).
16. Y. Lecun and Y. Bengio, The handbook of Brain Theory and Neural Networks **1**, 255 (1995).
17. A. Jain, J. Mao, and K. Mohiuddin, Computer **29**(3), 31 (1996).
18. P. Domingos, *The Master Algorithm: How the Quest for the Ultimate Learning Machine Will Remake Our World*, Basic Books, N.Y. (2015).
19. L. Deng, Y. Xu, and Y. Liu, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **52**, 101073 (2022).
20. A. Nikulin, I. Zisman, M. Eich, A. Y. Petrov, and A. Itin, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **52**, 101076 (2022).
21. Z. Liu, D. Zhu, L. Raju, and W. Cai, Adv. Sci. **8**(5), 2002923 (2021).
22. P. R. Wiecha, A. Arbouet, C. Girard, and O. L. Muskens, Photon. Res. **9**(5), B182 (2021).
23. B. Duan, B. Wu, J.-h. Chen, H. Chen, and D.-Q. Yang, Frontiers in Materials **8**, 1 (2022).
24. J. Sanchez-Dehesa, A. Hakansson, and L. Sanchis, *Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering*, Bellingham, WA (2004), v. 5450, p. 200.
25. A. Luce, A. Mahdavi, F. Marquardt, and H. Wankerl, JOSA A **39**(6), 1007 (2022).
26. Т. Крылова, *Интерференционные покрытия*, Машиностроение, Л. (1976).
27. P. Baumeister, Appl. Opt. **25**(16), 2644 (1986).
28. S. E. Svyakhovskiy, A. I. Maydykovsky, and T. V. Murzina, J. Appl. Phys. **112**(1), 013106 (2012).

Обратный эффект Фарадея в сверхпроводниках с конечной щелью в спектре возбуждений

А. В. Путилов⁺¹⁾, С. В. Миронов⁺, А. С. Мельников⁺⁺, А. А. Беспалов⁺

⁺Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н.Новгород, Россия

⁺⁺Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 30 марта 2023

После переработки 17 апреля 2023 г.

Принята к публикации 17 апреля 2023 г.

В работе построено аналитическое описание обратного эффекта Фарадея (генерации не зависящего от времени магнитного момента под действием циркулярно поляризованной электромагнитной волны) в мезоскопических сверхпроводящих образцах с конечной величиной щели в спектре возбуждений. В рамках модифицированной нестационарной теории Гинзбурга–Ландау (уравнений Крамера–Уоттс–Тобина) для тонких сверхпроводящих дисков показано, что в широком диапазоне параметров зависимость оптически индуцированного магнитного момента от температуры немонотонна и содержит максимум, обусловленный расфазировкой колебаний модуля и фазы параметра порядка при понижении температуры и соответствующем уменьшении характерного времени релаксации возмущений в сверхпроводящем конденсате.

DOI: 10.31857/S123456782311006X, EDN: djnvex

Исследование механизмов управления магнитными состояниями в сверхпроводниках с помощью электромагнитного излучения является бурно развивающейся областью физики конденсированных сред, что обусловлено перспективами их использования в квантовых вычислительных устройствах [1, 2], элементах сверхпроводящей спинтроники [3, 4] и динамически перестраиваемых джозефсоновских системах [5–8]. Ключевым параметром, определяющим характер воздействия излучения на сверхпроводники, является отношение энергии фотонов к величине щели в спектре возбуждений сверхпроводника. Для излучения оптического диапазона это отношение существенно больше единицы, поэтому доминирующим механизмом воздействия излучения на сверхпроводник является рождение квазичастиц, которое может приводить как к нагреву образца и подавлению сверхпроводимости, так и стимулированию сверхпроводимости за счет увеличения сверхпроводящей щели при генерации неравновесных квазичастиц [9–12]. В недавних экспериментах было продемонстрировано, что локальный разогрев сверхпроводника сфокусированным лазерным пучком позволяет осуществлять управление положением одиночных магнитных вихрей Абрикосова [13], что открывает возможность создания джозефсоновских контактов с перестраиваемым ток-фазовым соотношением [5].

Вместе с тем, для излучения с энергией фотонов меньше сверхпроводящей щели становятся существенными эффекты, зависящие не только от энергии фотонов и плотности их потока, но и от поляризации электромагнитной волны. Так, в серии работ [14–17] было показано, что циркулярно поляризованное излучение инфракрасного диапазона может индуцировать в сверхпроводящем образце магнитный момент, среднее значение которого по времени отлжно от нуля, а направление определяется поляризацией падающей волны. Это явление, называемое обратным эффектом Фарадея, было впервые предсказано для материалов без поглощения Л. П. Питаевским [18] и экспериментально обнаружено в ферромагнитных изоляторах [19–22], а затем и в проводящих материалах [23, 24] (теоретические подходы к описанию обратного эффекта Фарадея в проводниках и полупроводниках были развиты в работах [25–33]). При этом использование ультракоротких лазерных импульсов позволяет индуцировать и контролировать осцилляции магнитного момента в образце с периодом порядка нескольких фемтосекунд и временем затухания порядка пикосекунды [22]. Фактически, воздействие циркулярно поляризованной волны на среду аналогично воздействию стационарного магнитного поля, способного вызывать как поляризацию электронных спинов, так и орбитальный диамагнитный отклик. В этом контексте, изучение обратного эффекта Фарадея в сверхпроводящих си-

¹⁾e-mail: alputilov@ipmras.ru

стемах представляет особый интерес, поскольку индуцированные лазерным импульсом диамагнитные сверхпроводящие токи при некоторых условиях могут продолжать существовать неограниченно долго после окончания импульса. В частности, если величина оптически индуцированного магнитного момента окажется достаточной для формирования абрикосовского вихря или состояния с ненулевой завихренностью в неодносвязном сверхпроводнике, то результирующие магнитные состояния будут обладать топологической защитой и не разрушатся при выключении излучения [16].

Простейшее описание обратного эффекта Фарадея в сверхпроводниках может быть построено в рамках нестационарной теории Гинзбурга–Ландау [14]. При этом ключевую роль в возникновении эффекта играет электрон-дырочная асимметрия в сверхпроводниках, приводящая к наличию мнимой части константы релаксации в уравнении Гинзбурга–Ландау и, как следствие, к возбуждению колебаний модуля параметра порядка под действием поля электромагнитной волны. Построенная в работах [14–17] теория позволяет проанализировать частотные зависимости оптически индуцированного магнитного момента и описать формирование топологически защищенных магнитных состояний в неодносвязных образцах, однако область ее применимости существенно ограничена случаем бесщелевых сверхпроводников и узким интервалом температур вблизи критической температуры сверхпроводящего фазового перехода.

Вместе с тем, хорошо известно, что область применимости нестационарной теории Гинзбурга–Ландау может быть существенно расширена в рамках подхода Крамера–Уоттс–Тобина [34–38], который учитывает конечную величину сверхпроводящей щели в присутствии достаточно сильного электрон-фононного взаимодействия. В настоящей работе в рамках данного подхода построено обобщение теории обратного эффекта Фарадея на случай сверхпроводников с конечной величиной щели, позволившее проанализировать температурные и частотные зависимости оптически индуцированного магнитного момента в широком диапазоне параметров системы. В частности, показано, что в широком интервале частот излучения зависимость магнитного момента M от температуры T немонотонна и содержит максимум, обусловленный изменением соотношения между частотой излучения и характерным обратным временем релаксации модуля параметра порядка, зависящим от времени. Несмотря на то, что данный эффект проявляется и в случае бесщелевой сверхпроводимости (см. работу [14]), учет конечной вели-

чины сверхпроводящей щели оказывается важным с точки зрения возможности экспериментального наблюдения эффекта, поскольку приводит к смещению максимума M вниз по температуре и, тем самым, позволяет указать наиболее реалистичные условия для экспериментального обнаружения обратного эффекта Фарадея.

В качестве модельного объекта рассмотрим тонкий сверхпроводящий диск толщины L с произвольным соотношением между радиусом R и сверхпроводящей длиной когерентности ξ . Будем предполагать, что на диск падает плоская циркулярно поляризованная электромагнитная волна с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}$, перпендикулярным поверхности диска (рис. 1). Для описания электромаг-

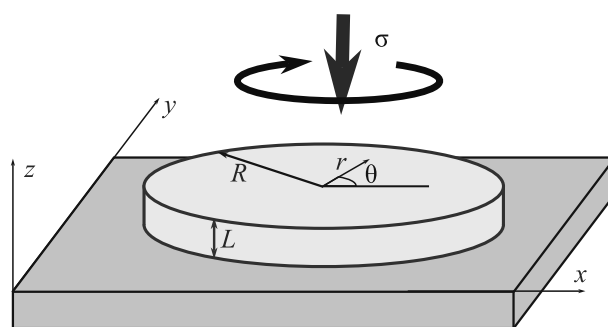


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение сверхпроводящего диска радиуса R и толщины L и падающей электромагнитной волны с циркулярной поляризацией σ . Также на рисунке показаны используемые в расчетах декартова и полярная системы координат

нитной волны будем использовать векторный потенциал в следующей калибровке: $\mathbf{A} = \text{Re} \tilde{\mathbf{A}} = (cE_0/\omega) \text{Re} [(\mathbf{e}_y - i\mathbf{e}_x) e^{-i\omega t - ikz}]$, где $k = \omega/c$ – модуль волнового вектора волны, а E_0 – амплитуда электрического поля внутри сверхпроводника. Связь этого поля с электрическим полем падающей электромагнитной волны E_{ext} существенно зависит от формы диска и определяется эффектами деполяризации. Для оценки заменим сверхпроводящий диск эллипсоидом с полуосями R , R и $L/2$ и воспользуемся решением стандартной задачи о деполяризации [39], которая дает:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{\text{ext}}}{1 + (\pi/8)(L/R)[\epsilon(\omega) - 1]}, \quad (1)$$

где $\epsilon(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость металла, которую будем вычислять, предполагая вклад от нормальных и сверхпроводящих электронов аддитивными. В пределе локальной связи между током и векторным потенциалом для сверхпроводящего кон-

денсата в приближении $\tau_{tr} \ll 1/\omega$, где τ_{tr} – характерное время рассеяния на примесях, выражение для $\epsilon(\omega)$ при температуре ниже критической температуры сверхпроводящего перехода T_c имеет вид:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{2\pi^2}{7\zeta(3)} \frac{T_c \tau_{tr}}{\hbar} \frac{\omega_p^2 \varepsilon}{\omega^2} + i \frac{\omega_p^2 \tau_{tr}}{\omega}, \quad (2)$$

где второе слагаемое соответствует вкладу сверхпроводящих электронов [40], третье слагаемое – вкладу нормальных электронов, величина $\omega_p^2 = 4\pi n_0 e^2/m$ – плазменная частота металла, n_0 – полная концентрация электронов, $\varepsilon = 1 - T/T_c$, а $\zeta(3) \approx 1.2$ – дзета-функция Римана. Вид зависимости $\epsilon(\omega)$ и, соответственно, линейная связь между $\tilde{\mathbf{A}}_{ext}$ и $\tilde{\mathbf{A}}$ определяется материальными и геометрическими параметрами образца. Отметим, что при $\omega \gg T_c \varepsilon$ диэлектрическая проницаемость определяется в основном нормальными электронами, и ее зависимостью от температуры можно пренебречь. В противоположном пределе ($\omega \ll T_c \varepsilon$) основной вклад в деполяризующий фактор обеспечивают сверхпроводящие электроны. В этом случае при частоте $\omega^* \sim \sim \omega_p \sqrt{(L/R)\varepsilon\tau_{tr}T_c/\hbar}$ происходит резонансное усиление действующего электромагнитного поля и, соответственно, магнитного момента. Далее будем находить величину магнитного момента диска как функцию действующего электромагнитного поля. Предполагая, что геометрические размеры диска много меньше лондоновской глубины проникновения λ , длины электромагнитной волны $2\pi c/\omega$ и глубины скин-слоя $\delta \sim c/(\omega_p \sqrt{\omega\tau_{tr}})$, можно считать что амплитуда электромагнитной волны в диске задается формулой (1) и не зависит от пространственных координат.

Для описания динамики параметра порядка будем использовать уравнение Крамера–Уоттс–Тобина [38], в котором феноменологически учтено наличие мнимой части константы релаксации, обусловленной электрон-дырочной асимметрией в плотности состояний:

$$\frac{\Gamma(u + i\gamma)}{\sqrt{\Gamma^2 + |\psi|^2}} \left(\psi_t + \frac{1}{2\Gamma^2} \psi \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} \right) - \xi_0^2 \alpha_0 \left(i\nabla - \frac{\mathbf{A}}{\Phi_0} \right)^2 \psi - \alpha_0 \varepsilon \psi + b |\psi|^2 \psi = 0. \quad (3)$$

В этом уравнении $\alpha_0 \varepsilon$ и b – обычные параметры теории Гинзбурга–Ландау, $\Phi_0 = \pi \hbar c/e$ – квант потока магнитного поля ($e > 0$), ξ_0 – длина когерентности, интерполированная к нулевой температуре, а $u = \hbar \pi \alpha_0 / (8T_c)$. Уравнение (3) отличается от нестационарного уравнения Гинзбурга–Ландау, во-первых, наличием дополнительного параметра $\Gamma =$

$\hbar \tau_{ph}^{-1}/2$, связанного со временем неупругой электрон-фононной релаксации τ_{ph} , и во-вторых, наличием мнимой части константы релаксации γ , имеющей относительный порядок $\gamma/u \propto T_c/E_F$. Для низкотемпературных и ряда высокотемпературных сверхпроводников имеет место неравенство $T_c/E_F \ll 1$, однако для некоторых высокотемпературных сверхпроводников отношение T_c/E_F может быть не слишком мало.

Несмотря на то, что уравнение (3) справедливо в узкой окрестности вблизи критической температуры, определяемой условием $\varepsilon \ll \Gamma/\Delta_0$, (где $\Delta_0 = \sqrt{\alpha_0/b}$ – интерполированный к нулю параметр порядка), данное ограничение является менее жестким, чем граница применимости нестационарной теории Гинзбурга–Ландау [38] $\varepsilon \ll (\Gamma/\Delta_0)^2$. Таким образом, использование уравнения (3) позволяет построить обобщение результатов работы [14] на область температур $0 \ll \varepsilon \ll \Gamma/\Delta_0$. Заметим, что уравнение (3) корректно описывает динамику параметра порядка при частотах $\omega \ll \tau_{ph}^{-1}$ [40].

Для простоты мы не учитываем электрохимический потенциал в уравнении (3), пренебрегая, тем самым, процессами конверсии сверхпроводящего тока в нормальный. Эти процессы происходят на масштабе $l_e \sim \xi(T)(1 + \psi_0^2/\Gamma^2)^{1/2}$, где $\psi_0 = \sqrt{\alpha_0 \varepsilon/b}$ – равновесное значение модуля параметра порядка, а $\xi = \xi_0/\sqrt{\varepsilon}$. Такое пренебрежение допустимо в случае, когда $l_e \gg \min(R, l_\omega)$, где l_ω – характерный масштаб локализации возмущений параметра порядка под действием электромагнитной волны. Масштаб l_ω определяется решением уравнения (3) и, как будет показано ниже, составляет $l_\omega = \xi_0(1 + \psi_0^2/\Gamma^2)^{1/4}/\sqrt{\omega\tau_0}$, $\tau_0 = u/\alpha_0$. В случае $\psi_0 \ll \Gamma$ масштаб конверсии l_e сравним с длиной когерентности ξ , так что область применимости используемого нами приближения определяется условием $\min[R/\xi, \sqrt{\varepsilon/(\omega\tau_0)}] \ll 1$. С другой стороны, в случае развитой сверхпроводимости $\psi_0 \gg \Gamma$ соотношение для масштаба конверсии принимает вид $l_e \sim \xi \psi_0/\Gamma$, что позволяет рассмотреть более широкую температурную область вблизи критической температуры, чем в работе [14], а также большие радиусы сверхпроводящих дисков. При этом ограничение на возможные величины R и ω при расчете обратного эффекта Фарадея принимает вид: $\min[R/\xi, \sqrt{\psi_0 \varepsilon/(\Gamma \omega \tau_0)}] \ll 1$.

Будем решать нестационарную задачу, используя теорию возмущений, малыми параметрами в которой является амплитуда падающей электромагнитной волны и параметр γ/u . Говоря о малой амплиту-

де падающей электромагнитной волны, мы имеем в виду, что индуцированное возмущение параметра порядка существенно меньше модуля параметра порядка в отсутствие волны. Будем считать, что решение уравнения (3) в нулевом порядке представляет собой однородный не зависящий от времени параметр порядка, амплитуда которого ψ_0 зависит от температуры, а фазу будем для определенности считать равной нулю. Для дальнейших расчетов удобно явно выделить амплитуду и фазу параметра порядка $\psi = |\psi| \exp(i\chi)$ и решать задачу методами теории возмущений: $|\psi| = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2 + \dots$, $\chi = \chi_1 + \chi_2 + \dots$, где ψ_j и χ_j ($j = 0, 1, 2, \dots$) пропорциональны малому параметру $[cE_0 R / (\Phi_0 \omega)]^j$. Введем безразмерный параметр $\beta = (1 + \psi_0^2 \Gamma^{-2})^{-1/2}$, который в предельном случае бесщелевой сверхпроводимости принимает значение $\beta = 1$, а в пределе низких температур $\beta \approx \Gamma \psi_0^{-1} \ll 1$. Тогда, в первом порядке теории возмущений уравнение (3) для ψ_1 и χ_1 принимает следующий вид:

$$\beta \psi_0 (iu - \gamma) \chi_{1t} + \beta^{-1} (u + i\gamma) \psi_{1t} - \xi_0^2 \alpha_0 \nabla^2 \psi_1 - i \xi_0^2 \alpha_0 \psi_0 \nabla^2 \chi_1 + 2\alpha_0 \varepsilon \psi_1 = 0. \quad (4)$$

Будем предполагать, что граничные условия для параметра порядка совпадают с граничными условиями стационарной теории Гинзбурга–Ландау:

$$\left. \frac{\partial \psi_1}{\partial r} \right|_{r=R} = 0; \quad \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial r} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}_r \right) \Big|_{r=R} = 0. \quad (5)$$

Рассматривая гармонические процессы, введем комплексные амплитуды $\tilde{p}$, соответствующие величинам p , (где в качестве p можно рассматривать любую из величин ψ_1 , χ_1 или $\mathbf{A}$), следующим образом:

$$p(r, \theta, t) = \text{Re} [\tilde{p}(r, \omega) e^{i\theta - i\omega t}]. \quad (6)$$

Так как система цилиндрически симметричная, будем искать решение уравнения (4) в виде

$$\tilde{\psi}_1 = \tilde{\psi}_{1q} J_1(qr), \quad \tilde{\chi}_1 = \tilde{\chi}_{1q} J_1(qr), \quad (7)$$

где $J_1(x)$ – функция Бесселя первого порядка. Подставляя выражение (7) в уравнение (4) и разделяя действительную и мнимую часть, получаем систему алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} i\omega \beta \nu \tilde{\chi}_{1q} - i\omega \tau \beta^{-1} \tilde{\psi}_{1q} + \xi^2 q^2 \tilde{\psi}_{1q} + 2\tilde{\psi}_{1q} = 0, \\ i\omega \tau \beta \tilde{\chi}_{1q} + i\omega \nu \beta^{-1} \tilde{\psi}_{1q} - \xi^2 q^2 \tilde{\chi}_{1q} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $\tau = \tau_0 / \varepsilon$, $\nu = \gamma / (\alpha_0 \varepsilon)$. Допустимые волновые числа q , входящие в выражение (7), определяется характеристическим уравнением системы (8) и имеют вид

(при выводе мы пренебрегаем слагаемыми порядка ν^2):

$$q_1 = \xi^{-1} \sqrt{i\omega \tau \beta^{-1} - 2}, \quad q_2 = \xi^{-1} \sqrt{i\omega \tau \beta}. \quad (9)$$

Следует отметить, что векторный потенциал $\mathbf{A}$ входит только в граничные условия (5), возбуждая колебания фазы параметра порядка. Далее, эти колебания фазы вследствие наличия электрон-дырочной асимметрии возбуждают колебания модуля параметра порядка, амплитуда которых пропорциональна E_0 . Характерный пространственный масштаб фазы определяется только волновым вектором q_2 ($l_\omega = 1/|q_2|$), тогда как масштаб возмущения модуля параметра порядка определяется обоими векторами q_1 и q_2 . С учетом граничных условий распределения модуля и фазы параметра порядка принимают вид:

$$\tilde{\chi}_1 = \frac{2\pi i c E_0}{\Phi_0 \omega} \frac{J_1(q_2 r)}{q_2 J_1'(q_2 R)}, \quad (10)$$

$$\tilde{\psi}_1 = \frac{2\psi_0 \pi c E_0 \nu \beta R}{\Phi_0 [2 + i\omega \tau (\beta - \beta^{-1})]} \left[\frac{J_1(q_2 r)}{q_2 J_1'(q_2 R)} - \frac{J_1(q_1 r)}{q_1 J_1'(q_1 R)} \right]. \quad (11)$$

Выражения (10) и (11) позволяют вычислить усредненную по времени азимутальную компоненту $\langle j_{s\theta} \rangle$ сверхпроводящего тока и величину среднего по времени магнитного момента M диска:

$$M = \frac{L}{c} \int_0^R \langle j_{s\theta} \rangle \pi r^2 dr, \quad (12)$$

где

$$\langle j_{s\theta}(r) \rangle = \frac{4\pi \alpha_0 T_c \xi_0^2 c}{\Phi_0} \psi_0^2 \text{Re} \left[\tilde{\psi}_1 \left(\frac{i\tilde{\chi}_1^*}{r} - \frac{2\pi}{\Phi_0} \tilde{A}_\theta^* \right) \right]. \quad (13)$$

Подставляя найденные выражения для $\tilde{\psi}_1$ и $\tilde{\chi}_1$ в (13) и проводя интегрирование по радиальной координате в (12), окончательно получаем выражение для не зависящей от времени компоненты магнитного момента:

$$M = G \frac{\gamma \beta R^4}{\omega} \text{Re} \left[\frac{2F}{2 + i\omega \tau (\beta - \beta^{-1})} \right], \quad (14)$$

$$F = \frac{2(x_1^2 f(x_2^*) - x_2^{*2} f(x_1))}{x_1^2 (x_1^2 - x_2^{*2})} - \frac{f(x_2^*) + f(x_2)}{x_2^2}. \quad (15)$$

В выражениях (13) и (14) $x_1 = q_1 R$, $x_2 = q_2 R$, $G = 8\pi^4 \xi_0^2 c^2 L E_0^2 \alpha_0 / (b \Phi_0^3)$ а функция $f(x)$ определена как $f(x) = J_2(x) / J_1'(x)$, где $J_n(x)$ – функция Бесселя порядка n , а $J_n'(x)$ – ее первая производная. Отметим, что при любых допустимых параметрах $|x_1| > |x_2|$ и $x_2^2 = -x_2^{*2}$.

Характер зависимостей рассчитанного магнитного момента M от температуры и частоты определяется соотношением между четырьмя ключевыми параметрами: частотой излучения ω , перенормированным обратным временем Гинзбурга–Ландау $\omega_{GL} = \beta\tau^{-1}$ и двумя обратными временами $\omega_{\Delta} = \beta\tau_T^{-1}$ и $\omega_{\chi} = \beta^{-1}\tau_T^{-1}$, где $\tau_T = \tau_0(R/\xi_0)^2$ – время Таулесса для диска.

Для иллюстрации механизма возникновения максимума на зависимостях $M(T)$ при заданной частоте рассмотрим сначала случай больших дисков, для которых $R \gg \xi_0$ (Δ_0/Γ). В этом случае возмущения модуля параметра порядка и электрохимического потенциала, обусловленного производной $\partial\chi/\partial t$, прижаты к краю диска, причем пространственный масштаб затухания ψ_1 , обусловленный волновым числом q_1 в выражении (9), зависит от соотношения между частотой излучения ω и величиной ω_{GL} . При фиксированной частоте в области высоких температур, где $\omega \gg \omega_{GL}$, волновое число q_1 зависит от T лишь в меру слабой зависимости $\beta(T)$, так что, с понижением температуры магнитный момент растет как $M \propto \varepsilon$, что соответствует температурной зависимости величины ψ_0^2 . При дальнейшем понижении температуры частота ω становится меньше ω_{GL} , и масштаб радиального затухания возмущений ψ_1 становится порядка ξ . При этом разность фаз между возмущением модуля параметра порядка и азимутальной компонентой скорости стремится к $\pi/2$, что, в соответствии с формулой (13), эффективно приводит к подавлению магнитного момента. Для описания кроссовера между двумя описанными режимами примем во внимание, что при больших модулях комплексного аргумента ранее определенная функция $f(x)$ может быть представлена в виде $f(x) = -1 + ix^{-1} - 0.5x^{-2} + O(x^{-3})$, что после подстановки в (14) дает следующее выражение для магнитного момента (соответствующие зависимости $M(T)$ показаны на рис. 2):

$$M = \frac{2G\gamma R^2 \xi_0^2}{\omega} \frac{\beta\varepsilon}{4\beta^2\varepsilon^2 + \omega^2\tau_0^2}. \quad (16)$$

Данная зависимость $M(\varepsilon)$ имеет максимум при $2\beta\varepsilon = \omega\tau_0$. Подстановка явного выражения для β в это условие приводит к квадратному уравнению относительно величины ε , соответствующей максимуму магнитного момента: $\omega\tau_0\sqrt{1 + \Delta_0^2\varepsilon/\Gamma^2} = 2\varepsilon$. В отличие от случая бесщелевых сверхпроводников, зависимость этой температуры от частоты является нелинейной. Физическая причина возникновения максимума связана с расфазировкой колебаний модуля и фазы параметра порядка при понижении

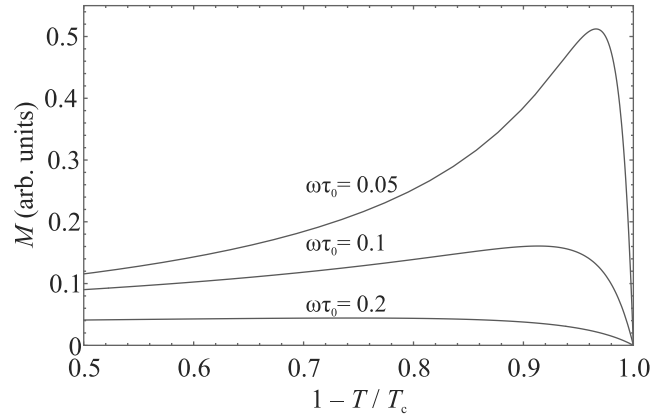


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости магнитного момента диска от температуры для разных частот падающей циркулярнополяризованной волны. Расчет выполнен для $R = 15\xi_0$, $\Delta_0 = 5\Gamma$

нии температуры и соответствующем уменьшении характерного времени релаксации возмущений в сверхпроводящем конденсате.

Теперь проанализируем зависимость магнитного момента от частоты при различных температурах. Для этого удобно использовать диаграммы на плоскости параметров температура–частота, показанные на рис. 3 для дисков с различным соотношением между радиусом R и пространственным масштабом ξ_0 (Δ_0/Γ). Области, пронумерованные римскими цифрами, соответствуют асимптотическим режимам, в которых магнитный момент различным образом зависит от температуры и частоты излучения, а сплошными линиями обозначены границы между областями. В пределе высоких частот, когда ω превышает все остальные характерные обратные времена ω_{GL} , ω_{Δ} и ω_{χ} (области I), выражение для M принимает вид

$$M_I = \frac{2G\gamma R^2 \xi_0^2 \beta\varepsilon}{\tau_0^2 \omega^3}. \quad (17)$$

В обратном предельном случае, когда частота излучения много меньше остальных характерных обратных времен, магнитный момент $M \propto E_0^2\omega$, однако множитель в этом выражении зависит от соотношения между радиусом и температурно зависящей длиной когерентности ξ : вблизи T_c (при $R \ll \xi$, области III)

$$M_{III} = \frac{73}{5760} \frac{G\gamma R^{10} \beta\varepsilon \omega \tau_0^2}{\xi_0^6}, \quad (18)$$

тогда как при более низких температурах, где $R \gg \xi$ (области IV),

$$M_{IV} = \frac{7}{192} \frac{G\gamma R^6 \beta \omega \tau_0^2}{\xi_0^2 \varepsilon}. \quad (19)$$

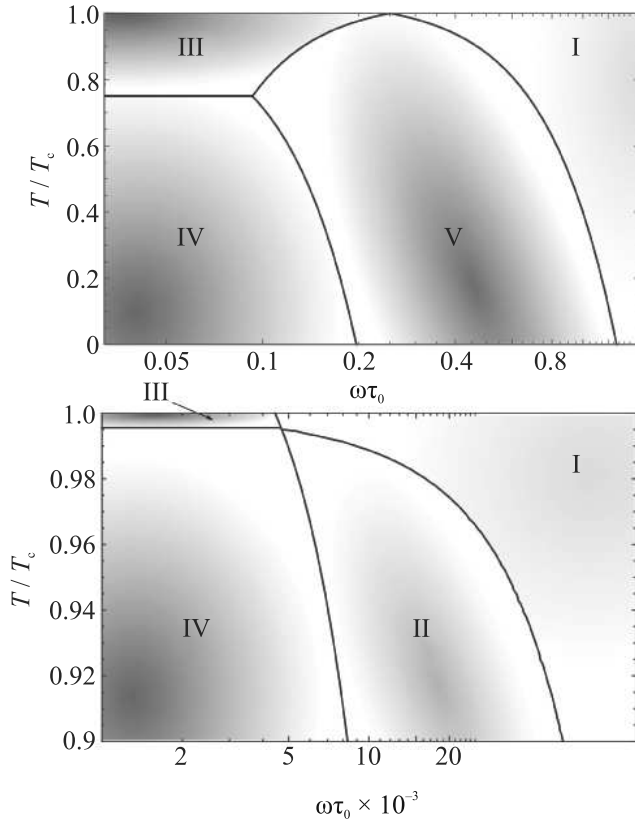


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематичное изображение различных областей параметров и асимптотик магнитного момента. (а) – $\Gamma/\Delta_0 = 0.2$, $R/\xi_0 = 2$. (б) – $\Gamma/\Delta_0 = 0.2$, $R/\xi_0 = 15$. Цветом схематично обозначены области применимости различных асимптотик выражения для магнитного момента. Граница между областями I и II, а также IV и V определяются соотношением: $\beta\varepsilon = \omega\tau_0$; между областями II и IV, I и III, а также I и V: $R^2\beta\omega\tau_0 = \xi_0^2$; между областями III и IV: $R^2\varepsilon = \xi_0^2$; между областями III и V: $R^2\omega\tau_0 = \beta\xi_0^2$

Заметим, что поведение магнитного момента в высокочастотном и низкочастотном пределах качественно совпадает с поведением M в случае бесщелевых сверхпроводников. Вместе с тем, в области промежуточных частот между этими двумя случаями имеются существенные различия. Главное из них заключается в существовании двух различных масштабов частот ω_Δ и ω_χ , которые совпадают друг с другом в пределе нулевой щели. Различие этих масштабов приводит к существованию области V на диаграмме для $R \ll \xi_0$ (Δ_0/Γ) (рис. 3а), которая отсутствует для бесщелевых сверхпроводников и в которой

$$M_V = \frac{7}{48} \frac{G\gamma R^6 \beta^3 \varepsilon}{\xi_0^2 \omega}. \quad (20)$$

Границы этой области определяются условием $\omega_\Delta \ll \omega \ll \omega_\chi$ для случая $R \ll \xi$ и условием $\omega_{GL} \ll \omega \ll$

$\ll \omega_\chi$ для случая $R \gg \xi$. В случае же дисков большого радиуса, для которых $R \gg \xi_0$ (Δ_0/Γ) (рис. 3б), область промежуточных частот (область II) ограничена интервалом частот $\omega_\chi \ll \omega \ll \omega_{GL}$ и существует только при $R \gg \xi$. Магнитный момент в этой области описывается выражением (16).

Следует отметить, что, в отличие от случая бесщелевых сверхпроводников, граница между областями I и II, на которой магнитный момент достигает максимума как функция температуры, является нелинейной, что смещает максимум в область более низких температур. Данное обстоятельство должно способствовать возможности более четкого экспериментального детектирования максимума, так как он соответствует области температур с развитой сверхпроводимостью. Также отметим, что аналогичный максимум на зависимостях $M(\varepsilon)$ наблюдается и при переходе из областей III в области IV для дисков произвольного радиуса.

Для экспериментального детектирования обратного эффекта Фарадея представляется оптимальным использование высокотемпературных купратов или сверхпроводников на основе железа. Их преимущество обусловлено, во-первых, сравнительно большой величиной Δ/E_F (и, соответственно, большой величиной γ) и, во-вторых, малыми значениями плотности состояний, способствующими меньшему деполяризованному подавлению поля. Рассматривая для оценки параметры $T_c \sim 100$ К и $\tau_{ph} \sim 10^{-12}$ с [41, 42], получаем характерные величины $\tau_0 \sim 2 \cdot 10^{-14}$ с, $\Gamma/\Delta_0 \sim 0.01$. В рамках нашей модели время электрон-фононной релаксации τ_{ph} накладывают ограничение на частоту излучения $\omega \lesssim \tau_{ph}^{-1}$. При таких частотах максимум на зависимости $M(T)$ достигается при температурах, определяемых условием $\beta\varepsilon = \omega\tau_0/2$, и составляет $T \sim T_c (1 - \omega^2/\omega_c^2)$, где $\omega_c \sim \tau_0 \Delta_0/\Gamma \sim 10^{12}$ с $^{-1}$. Также следует отметить, что альтернативным методом детектирования обратного эффекта Фарадея является неравновесное возбуждение и последующее детектирование вихрей разной полярности с помощью механизма Киббла-Зурека (см. работу [43] и ссылки в ней). В этом случае динамика вихрей, возникающая после быстрого охлаждения образца, приводит к преимущественному выходу из диска вихрей одной полярности. При этом одним из ключевых параметров, определяющих итоговую разность числа вихрей противоположной полярности, является масштаб локализации сверхпроводящего тока вблизи края диска, который определяется величиной l_ω . Эта величина существенно больше в модели Крамера-Уоттс-Тобина по сравнению с моделью бесщелевой сверхпроводимости, что

должно приводить к более эффективной генерации ненулевой завихренности диска.

Таким образом, в работе показано, что зависимости магнитного момента диска от температуры имеют максимум в широком диапазоне параметров системы. Для дисков достаточно большого радиуса $R \gg \xi_0 \Delta_0 / \Gamma$ в пределе высоких частот (при $\omega \gg \tau_T^{-1}$) максимум достигается при температурах, определяемых условием $\omega_{GL} \sim \omega/2$, тогда как в обратном предельном случае (при $\omega \ll \tau_T^{-1}$) положение максимума определяется условием $\xi \sim R$. Также показано, что для малых дисков с радиусом $R \ll \xi_0 \Delta_0 / \Gamma$ наличие конечной сверхпроводящей щели в спектре возбуждений приводит к возникновению новых режимов, которые отсутствуют в случае бесщелевых сверхпроводников. В частности, при $\beta < 1$ возникает интервал частот излучения, в котором магнитный момент диска зависит от температуры и частоты как $M \sim E_0^2 \beta^3 \varepsilon / \omega$. В заключение отметим, что эффекты деполяризации, описываемые уравнением (1), могут приводить к изменению частотных и температурных зависимостей магнитного момента, поэтому определение параметров, оптимальных с точки зрения экспериментального детектирования описанных в работе эффектов, требует анализа геометрии конкретного образца.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда # 21-72-10161. Часть работ по анализу асимптотик частотных зависимостей магнитного момента выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ # 075-03-2022-106 (проект FSMG-2023-0011) Московского физико-технического института (А. С. Мельников).

1. I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans, and J. E. Mooij, *Science* **299**, 1869 (2003).
2. S. Anders, M. G. Blamire, F.-I. Buchholz, D.-G. Cr  t  , R. Cristiano, P. Febvre, L. Fritzsche, A. Herr, E. Il'ichev, J. Kohlmann, J. Kunert, H.-G. Meyer, J. Niemeyer, T. Ortlev, H. Rogalla, T. Schurig, M. Siegel, R. Stolz, E. Tarte, H. J. M. ter Brake, H. Toepfer, J.-C. Villegier, A. M. Zagorskin, and A. B. Zorin, *Phys. C* **410**, 2079 (2010).
3. M. Eschrig, *Adv. Phys.* **55**, 47 (2006).
4. J. Linder and J. Robinson, *Nat. Phys.* **11**, 307 (2015).
5. S. Mironov, E. Goldobin, D. Koelle, R. Kleiner, Ph. Tamarat, B. Lounis, and A. Buzdin, *Phys. Rev. B* **96**, 214515 (2017).
6. W. Magrini, S. V. Mironov, A. Rochet, P. Tamarat, A. I. Buzdin, and B. Lounis, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 142601 (2019).
7. S. Mironov, H. Meng, and A. Buzdin, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 162601 (2020).
8. S. V. Mironov and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **104**, 134502 (2021).
9. G. M. Eliashberg, *Pis'ma v ZhETF* **11**, 186 (1970) [*JETP Lett.* **11**, 114 (1970)].
10. T. M. Klapwijk, J. N. van den Bergh, and J. E. Mooij, *J. Low Temp. Phys.* **26**, 385 (1977).
11. D. Fausti, R. I. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. C. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, and A. Cavalleri, *Science* **331**, 189 (2011).
12. R. Mankowsky, A. Subedi, M. F  rst et al. (Collaboration), *Nature* **516**, 71 (2014).
13. S. Veshchunov, W. Magrini, S. V. Mironov, A. G. Godin, J.-B. Trebbia, A. I. Buzdin, Ph. Tamarat, and B. Lounis, *Nat. Commun.* **7**, 12801 (2016).
14. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, I. D. Tokman, V. Vadimov, B. Lounis, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 137002 (2021).
15. M. D. Croitoru, B. Lounis, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **105**, L020504 (2022).
16. M. D. Croitoru, S. V. Mironov, B. Lounis, and A. I. Buzdin, *Adv. Quantum Technol.* **5**, 2200054 (2022).
17. V. D. Plastovets, I. D. Tokman, B. Lounis, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **106**, 174504 (2022).
18. L. P. Pitaevskii, *JETP* **12**, 1008 (1961).
19. J. P. van der Ziel, P. S. Pershan, and L. D. Malmstrom, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 190 (1965).
20. A. Kirilyuk, A. V. Kimel, and T. Rasing, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2731 (2010).
21. A. Kirilyuk, A. V. Kimel, and T. Rasing, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 026501 (2013).
22. V. Kimel, A. Kirilyuk, P. A. Usachev, R. V. Pisarev, A. M. Balbashov, and Th. Rasing, *Nature* **435**, 655 (2005).
23. C. D. Stanciu, F. Hansteen, A. V. Kimel, A. Tsukamoto, A. Itoh, A. Kirilyuk, and Th. Rasing, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 207401 (2007).
24. O. H.-C. Cheng, D.-J. H. Son, and M. Sheldon, *Nature Photon.* **14**, 365 (2020).
25. R. Hertel, *J. Magn. Mag. Materials* **303**, L1 (2006).
26. R. Hertel and M. F  hnle, *Phys. Rev. B* **91**, 020411(R) (2015).
27. M. Battiato, G. Barbalinardo, and P. M. Oppeneer, *Phys. Rev. B* **89**, 014413 (2014).
28. I. D. Tokman, *Phys. Lett. A* **252**, 83 (1999).
29. G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, *Europhys. Lett.* **85**, 47001 (2009).
30. K. L. Koshelev, V. Yu. Kachorovskii, and M. Titov, *Phys. Rev. B* **92**, 235426 (2015).
31. K. L. Koshelev, V. Yu. Kachorovskii, M. Titov, and M. S. Shur, *Phys. Rev. B* **95**, 035418 (2017).
32. O. V. Kibis, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 106802 (2011).

33. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, Phys. Rev. B **103**, 165411 (2021).
34. L. Kramer and R. J. Watts-Tobin, Phys. Rev. Lett. **40**, 1041 (1978).
35. R. J. Watts-Tobin, Y. Krähenbühl, and L. Kramer, J. Low Temp. Phys. **42**, 459 (1981).
36. А. А. Голуб, ЖЭТФ **71**, 341 (1976).
37. G. Shon and V. Ambegaokar, Phys. Rev. B **19**, 3515 (1979).
38. Б. И. Ивлев, Н. Б. Копнин, Успехи физических наук **142**, 435 (1984) [B. I. Ivlev and N. B. Kopnin, Sov. Phys.-Uspekhi **27**, 206 (1984)].
39. Л. Д. Ландау, Л. П. Питаевский, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, М. (2001).
40. N. B. Kopnin, *Theory of Nonequilibrium Superconductivity*, Oxford Science, London (2001).
41. S. G. Doettinger, S. Kittelberger, R. P. Huebener, and C. C. Tsuei, Phys. Rev. B **56**, 14157 (1997).
42. A. Pashkin, M. Porer, M. Beyer, K. W. Kim, A. Dubroka, C. Bernhard, X. Yao, Y. Dagan, R. Hackl, A. Erb, J. Demsar, R. Huber, and A. Leitenstorfer, Phys. Rev. Lett. **105**, 167001 (2010).
43. V. D. Plastovets, I. D. Tokman, B. Lounis, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B **106**, 174504 (2022).

Тайны воды и других аномальных жидкостей: “медленный” звук, релаксирующие сжимаемость и теплоемкость (Миниобзор)

В. В. Бражкин¹⁾, И. В. Данилов, О. Б. Циок

Институт физики высоких давлений РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 апреля 2023 г.

После переработки 24 апреля 2023 г.

Принята к публикации 24 апреля 2023 г.

Проведен анализ причин существования “быстрого” звука на терагерцовых частотах в различных жидкостях. Показано, что величина скорости “быстрого” звука хорошо описывается обычной формулой из теории упругости: $V_l = ((B(\omega) + 4/3G(\omega))/\rho)^{1/2}$, где ρ – плотность жидкости, а $B(\omega)$ и $G(\omega)$ – модули объемного сжатия и сдвига на соответствующих частотах. В “нормальных” жидкостях превышение значения скорости “быстрого” звука над скоростью обычного звука составляет 10–20 %, при этом оно почти полностью определяется вкладом модуля сдвига $G(\omega)$ на высоких частотах и обнуляется на линии Френкеля. В то же время в некоторых жидкостях (далее называемых “аномальными”), таких как вода и расплав теллура, огромное (50–120 %) превышение скорости “быстрого” звука над скоростью “нормального” связано, главным образом, с сильной частотной зависимостью модуля объемного сжатия $B(\omega)$. Аномально низкие значения релаксирующего модуля сжатия ранее были изучены нами для многих оксидных и халькогенидных стекол в области размытых фазовых превращений под давлением. В аномальных жидкостях также происходят размытые фазовые превращения в широкой области температур и давлений, что приводит к резкому снижению модулей сжатия и скоростей звука. Таким образом, рекордно большая разница между скоростями “быстрого” и “нормального” звука в аномальных жидкостях связана не с аномально “быстрым” звуком, а с тем, что “нормальный” звук в таких жидкостях является аномально “медленным”, а модули сжатия – аномально малыми. Ультразвуковые исследования аморфных льдов H_2O низкой плотности (low density amorphous – lda) и высокой плотности (high density amorphous – hda) показывают, что их модуль сжатия, действительно, в 4–5 раз превышает модуль сжатия воды. Размытые фазовые превращения в воде и расплаве теллура приводят также к аномально большим значениям теплоемкости – в 1.5–2 раза выше, чем у “нормальных” жидкостей, т.е. для аномальных жидкостей характерны не только аномальное (немонотонное) поведение физических величин, но и их аномальные абсолютные значения для большинства доступных методик измерения. Аналогичное аномальное увеличение сжимаемости и теплоемкости наблюдается, как известно, для всех флюидов в близкой окрестности критической точки жидкость–газ. На терагерцовых частотах при этом наблюдается аномально “быстрый” звук, что также связано с резким ростом величины модуля сжатия $B(\omega)$ на высоких частотах. Вместе с тем, для аномальных жидкостей и стекол в области размытых фазовых превращений высокая сжимаемость и теплоемкость, как и большое превышение “быстрого” звука над “нормальным”, не обязательно связаны с близостью критических точек и имеют место при любом сценарии размытого фазового превращения.

DOI: 10.31857/S1234567823110071, EDN: djpgwi

1. Введение. Вода, по-видимому, является рекордсменом среди жидкостей по числу наблюдаемых в ней аномалий [1, 2]. В первую очередь, это многочисленные экстремумы (плотности, теплоемкости, сжимаемости, поверхностного натяжения и пр.), которые наблюдаются при изменении температуры и (или) давления. Дискуссии о генезисе загадочного поведения воды продолжаются. Помимо сложной

иерархии межчастичного взаимодействия, сильной водородной связи, квантовых эффектов, связанных с ионами водорода, основной причиной многочисленных аномалий в воде в настоящее время считается наличие 2-х типов ближнего и промежуточного порядка (высокой и низкой плотности). Наличие 2-х типов структуры в воде предполагалось еще 130 лет назад в работе В. Рентгена [3]. Большинство исследователей “верят” в существование “настоящего” фазового перехода 1-го рода между двумя различными

¹⁾e-mail: brazhkin@hppi.troitsk.ru

фазами воды с критической точкой перехода в переохлажденной области при повышенных давлениях [4, 5]. В то же время, не исключены и сценарий плавного кроссовера между различными состояниями воды при любых P , T -параметрах и отсутствие какой-либо критической точки для данного превращения [2, 6].

Заметим, что имеется достаточно широкий класс халькогенидных расплавов, таких как Te , Se-Te , Ga-Te , Ge-Te [7–14], для которых также наблюдаются аналогичные аномалии плотности, сжимаемости, теплоемкости и т.д. В дальнейшем эти жидкости, как и воду, мы будем называть “аномальными”.

В то время как при нормальном давлении примеры аномального поведения и превращений в жидкостях немногочисленны, при высоких давлениях размытые и резкие структурные превращения в расплавах наблюдаются для многих систем [15]. Для ряда веществ (цезий, рубидий, барий, углерод, теллур, кальций, литий, натрий и др.) наблюдаются максимумы на кривых плавления [16, 17]. Свыше 50-ти лет назад было осознано, что эти максимумы могут быть связаны с размытыми превращениями в жидкости [18–20]. Более того, для описания поведения таких расплавов Рапопортом была предложена “двухжидкостная” модель регулярных растворов [18], которая впоследствии была развита Аптекарем и Понятовским, см. [21, 22] и ссылки в данных работах. Первым примером резкого фазового перехода, сопровождаемого скачками объема, тепловыми эффектами и аномалиями электросопротивления, является обнаруженный нашей группой переход полупроводник-металл под давлением в расплаве селена [23, 24]. Для данного превращения также впервые была обнаружена критическая точка при высоких температурах. Впоследствии нами были обнаружены резкие переходы, сопровождаемые металлизацией, в расплавах серы, фосфора и йода [15, 25–29], слабые аномалии электросопротивления и объема под давлением в расплавах висмута, теллура и олова [15, 29–32]. В работах японских и французских групп впоследствии были детально исследованы фазовые переходы первого рода под давлением в расплавах фосфора [33–35] и серы [36], которые также заканчиваются критической точкой при высоких температурах. Помимо расплавов элементарных веществ, в последние десятилетия нами были изучены размытые и резкие структурные превращения под давлением для расплавов многих соединений – B_2O_3 , P_2O_5 , AsS , As_2S_3 , ZnCl_2 , AlCl_3 [37–44]. Интересные примеры резких превращений под давлением в расплавах CdTe , SnI_4 обнаружены японскими исследователями

[45, 46]. В целом, можно заключить, что резкие фазовые переходы в расплавах – это, скорее, исключение, нежели правило. Нами был получен теоретический критерий того, является ли превращение в жидкости резким или происходит плавным кроссовером [47]. Основным параметром данного критерия служит соотношение размеров минимального зародыша новой фазы и области промежуточного порядка в неупорядоченных средах. Современное состояние превращений в расплавах подробно рассмотрено в недавнем обзоре Танаки [48].

Структурные превращения под давлением наблюдаются не только в расплавах, но и в стеклах. Нами были изучены размытые превращения в таких стеклах, как $g\text{-SiO}_2$, $g\text{-GeO}_2$, $g\text{-B}_2\text{O}_3$, $g\text{-As}_2\text{S}_3$, $g\text{-As}_2\text{Te}_3$, $g\text{-GeSe}_2$, $g\text{-GeS}_2$, $g\text{-Se}$ [37, 49–60]. Поскольку стекла являются метастабильными неравновесными системами, то превращения в них, естественно, происходят вдали от условного термодинамического равновесия [37, 49–61]. Уникальная тензометрическая методика измерения плотности стекол под давлением, разработанная в нашей группе [62], позволила впервые в мире детально исследовать релаксирующую сжимаемость в стеклах при размытых переходах. Примеры резких превращений в стеклах и аморфных твердых телах крайне немногочисленны. Достоверно можно говорить лишь о фазовом переходе между 2-мя фазами аморфного льда lda-hda (аморфный лед низкой – low density amorphous и высокой плотности – high density amorphous) [63]. Метод ультразвуковых исследований упругих характеристик веществ при высоких давлениях и низких температурах, разработанный в нашей группе, позволил впервые измерить модули объемного сжатия и модули сдвига аморфных льдов lda и hda и изучить детали превращения между данными аморфными модификациями [64–69].

Таким образом, наличие размытого превращения в воде не является чем-то уникальным. Уникальным является лишь то, что многие аномалии в воде наблюдаются при условиях, близких к нормальным. В то же время, большой объем имеющихся экспериментальных данных об особенностях переходов в неупорядоченных средах под давлением позволил прояснить многие аспекты данных превращений. Очевидно, что понимание этих деталей должно помочь при анализе аномального поведения воды при нормальном давлении.

Техника неупругого рентгеновского рассеяния с использованием мощного синхротронного излучения, развитая в 1990-е гг., позволила обнаружить еще одно замечательное явление – “быстрый” звук в

некоторых жидкостях. Явление заключается в существенном превышении эффективной скорости звука на терагерцовых частотах по сравнению с гидродинамической скоростью звука [70–73]. Термин “быстрый звук” был “занят” и ранее применялся к описанию высокой скорости звука в газовых смесях, содержащих легкую компоненту. Поэтому в ряде статей делалось предложение использовать более корректный термин “положительная дисперсия звука” или “высокочастотный звук” [74]. Однако интерес к новому явлению был столь высок, что термин “быстрый звук” закрепился именно за ним. Вода была, по-видимому, первым примером жидкости, где “быстрый” звук был надежно обнаружен [73]. Хотя впоследствии положительная дисперсия звука была обнаружена у многих жидкостей, интерес к “быстрому” звуку именно в воде не ослабевает [75]. Исследователи задаются вопросом: является ли “быстрый” звук в воде еще одной аномалией или это тривиальное проявление вязкоупругого перехода в жидкостях на высоких частотах [73].

В настоящей работе мы рассмотрим особенности проявления “быстрого” звука в различных классах жидкостей как “нормальных”, так и “аномальных”. Затем мы обсудим поведение модуля объемного сжатия для стекол в окрестности размытых превращений под давлением. Аномальное уменьшение модуля на низких частотах, наблюдаемое в стеклах, должно наблюдаться и при размытых превращениях в расплавах. Как мы покажем, именно это является причиной аномального “быстрого” звука в некоторых жидкостях, включая воду. Наконец, впервые будет дано объяснение того факта, что не только температурные и барические зависимости многих характеристик в аномальных жидкостях являются немонотонными, но и сами абсолютные величины таких характеристик, как сжимаемость и теплоемкость, являются аномально высокими.

2. “Быстрый” звук в жидкостях. Явление “быстрого” звука в воде привлекло внимание исследователей еще в 1980-е гг., см. [73] и ссылки в данной работе. Из данных неупругого нейтронного рассеяния и компьютерного моделирования следовало, что на высоких частотах продольная скорость звука в воде в 2 раза превышает гидродинамическую скорость звука. Однако эти результаты были во многом неоднозначными, поскольку отсутствовали надежные данные при малых и промежуточных значениях волнового вектора. Лишь после исследований методом неупругого рассеяния рентгеновских лучей наличие “быстрого” звука в воде стало общепризнанным [73, 76]. Существенное превышение ско-

рости звука по сравнению с гидродинамической наблюдалось при волновых векторах $Q > 1 \text{ нм}^{-1}$ (см. рис. 1). Впоследствии методом неупругого рассеяния ультрафиолетовых лучей и Бриллюэновского рассеяния было установлено, что отклонение скорости звука от гидродинамической начинается при еще меньших значениях волнового вектора $Q \sim 0.1 \text{ нм}^{-1}$ [71]. После 10 лет исследований победила точка зрения, что “быстрый” звук в воде – это обычное проявление вязкоупругого перехода в жидкостях на высоких частотах [73]. Тем не менее, последующие исследования различных жидкостей показали, что это не совсем так.

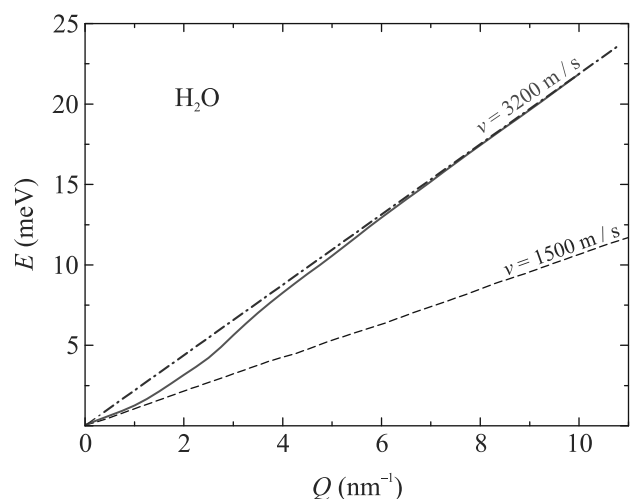


Рис. 1. (Цветной онлайн) Дисперсионная кривая продольных возбуждений в воде по литературным данным, см. [73] и ссылки в данной работе. Штриховая линия соответствует гидродинамическому низкочастотному звуку в воде; штрих-пунктирная – “быстрому” звуку в воде на высоких частотах

За 15–25 лет исследований жидкостей методом неупругого рентгеновского рассеяния явление положительной дисперсии звука на больших волновых векторах обнаружено и исследовано для десятков жидкостей различной природы – молекулярных жидкостей, жидких инертных газов, металлических и полупроводниковых расплавов [70, 72, 77–82]. Явление “быстрого” звука также имело место и в модельных системах, изученных методом компьютерного моделирования, в том числе в таких простых, как система “мягких сфер” (система частиц со степенным потенциалом отталкивания) [83–85]. Более того, сначала в модельных системах [83, 86], а при увеличении чувствительности измерений – и в реальных жидкостях, на высоких частотах были обнаружены поперечные звуковые возбуждения, см. [80, 81] и ссылки в них. Эти сдвиговые возбуждения распространяют-

ся в жидкостях, лишь начиная с некоторого конечного волнового вектора, т.е. для поперечной ветви возбуждений в спектре имеется щель по волновому вектору (Q -gap) [82, 87]. $Q_{\text{gap}} \sim 1/(\tau \cdot V_t)$, где V_t – скорость поперечного звука, τ – время релаксации в жидкости. Соответственно $\lambda \sim \tau \cdot V_t$ – максимальная длина поперечной волны, которая может распространяться в жидкости. Это, конечно, упрощенная картина. В действительности, имеется распределение времен релаксации, и ширина этого распределения зависит от температуры. Более того, сдвиговые возбуждения вблизи Q_{gap} являются сильно затухающими и не влияют на дисперсию продольных волн [82, 87] (см. также обсуждение ниже в параграфе 4). С ростом температуры вязкость и время релаксации в жидкости падает, и при достижении определенных P , T -параметров щель в спектре сдвиговых возбуждений сверхкритического флюида распространяется на всю первую псевдозону Бриллюэна, т.е. собственные поперечные возбуждения в системе отсутствуют на всех доступных частотах [86, 87]. Линия на фазовой диаграмме, разделяющая область жидкости, поддерживающей сдвиговые возбуждения на высоких частотах, от квазигазового флюида без поперечных возбуждений, названа нами линией Френкеля [84, 88–90]. В настоящее время линия Френкеля изучена для многих реальных флюидов [91]. В рамках обычной вязко-упругой модели появление поперечной ветви возбуждений при больших волновых векторах автоматически должно приводить к появлению “быстрого” звука [82, 84, 86, 87]. Действительно, для среды, имеющей ненулевой модуль сдвига, скорость продольного звука

$$V_l = ((B + 4/3G)/\rho)^{1/2}, \quad (1)$$

в то время как для гидродинамической скорости звука на низких частотах имеем $V_h = (B/\rho)^{1/2}$, где B и G – адиабатические модули объемного сжатия и сдвига, соответственно. Скорость поперечного звука $V_t = (G/\rho)^{1/2}$. Фактор увеличения скорости “быстрого” по сравнению с “нормальным” должен составить $V_l/V_h = (1 + 4G/3B)^{1/2}$ [87]. Удивительно, что этот тривиальный анализ никто до нас не применял [87]. Оказалось, что учет поперечных возбуждений действительно описывает масштаб “быстрого” звука для многих жидкостей (см. рис. 2). Видно, что общеизвестная из теории упругости формула (1) предсказывает величину “быстрого” звука как в модельных системах, так и во всех реальных расплавах, где сдвиговые возбуждения на высоких частотах фиксируются относительно надежно [83, 85]. Точность экспериментальных данных и большое затухание воз-

буждений пока не позволяют надежно определить величину щели по волновому вектору для поперечных возбуждений. Однако для модельной системы “мягких сфер” (рис. 2а, б) видно, что положительная дисперсия продольного звука (превышение скорости над гидродинамической) начинается примерно при тех же волновых векторах, где появляются сдвиговые возбуждения (см. также параграф 4). Фактор превышения скорости “быстрого” звука над гидродинамической V_l/V_h составляет 1.15–1.2 – для жидких металлов и модельных систем и 1.3–1.4 – для полуметаллических и полупроводниковых расплавов. Соответственно, отношение величин модулей G/B имеет вполне обычные значения в интервале 0.2–0.7.

Вместе с тем, для воды этот фактор превышения скорости “быстрого” звука составляет 2.13, что соответствует абсолютно нефизическим значениям отношения $G/B = 3.8$. Заметим, что для кристаллического льда $G/B = 0.5$. Очевидно, что формула (1) в таком простом виде в данном случае неприменима. При этом вода является не единственным примером жидкости с аномально большим “быстрым” звуком. Из изученных расплавов аномально большое увеличение скорости звука на высоких частотах наблюдалось также для расплава теллура [10] и расплава ртути вблизи критической точки жидкость – газ в области перехода металл–диэлектрик [74] (см. рис. 3). В то же время при нормальных условиях фактор превышения скорости “быстрого” звука в расплаве ртути имеет обычные для металлических расплавов значения – 1.17 [74].

Если для воды причина аномально большой величины “быстрого” звука практически не обсуждалась, то для расплавов теллура и ртути авторы связывали аномальный “быстрый” звук с переходом металл–диэлектрик и с большими флуктуациями плотности. В расплавах теллура и его соединений, как уже говорилось, имеется размытое превращение в широкой области температур с аномальным поведением плотности, сжимаемости и других величин [7–14]. Таким образом, аномально большой “быстрый” звук наблюдается в системах, где имеется размытое по температуре (и давлению) фазовое превращение. Какова причина аномального “быстрого” звука? Очевидно, что вязко-упругая модель жидкости в любом случае должна давать правильные результаты. Ответ состоит в том, что в формуле (1) мы не учитывали частотную зависимость модулей объемного сжатия и сдвига. Правильная формула для скорости звука следующая:

$$V_l(\omega) = ((B(\omega) + 4/3G(\omega))/\rho)^{1/2}. \quad (2)$$

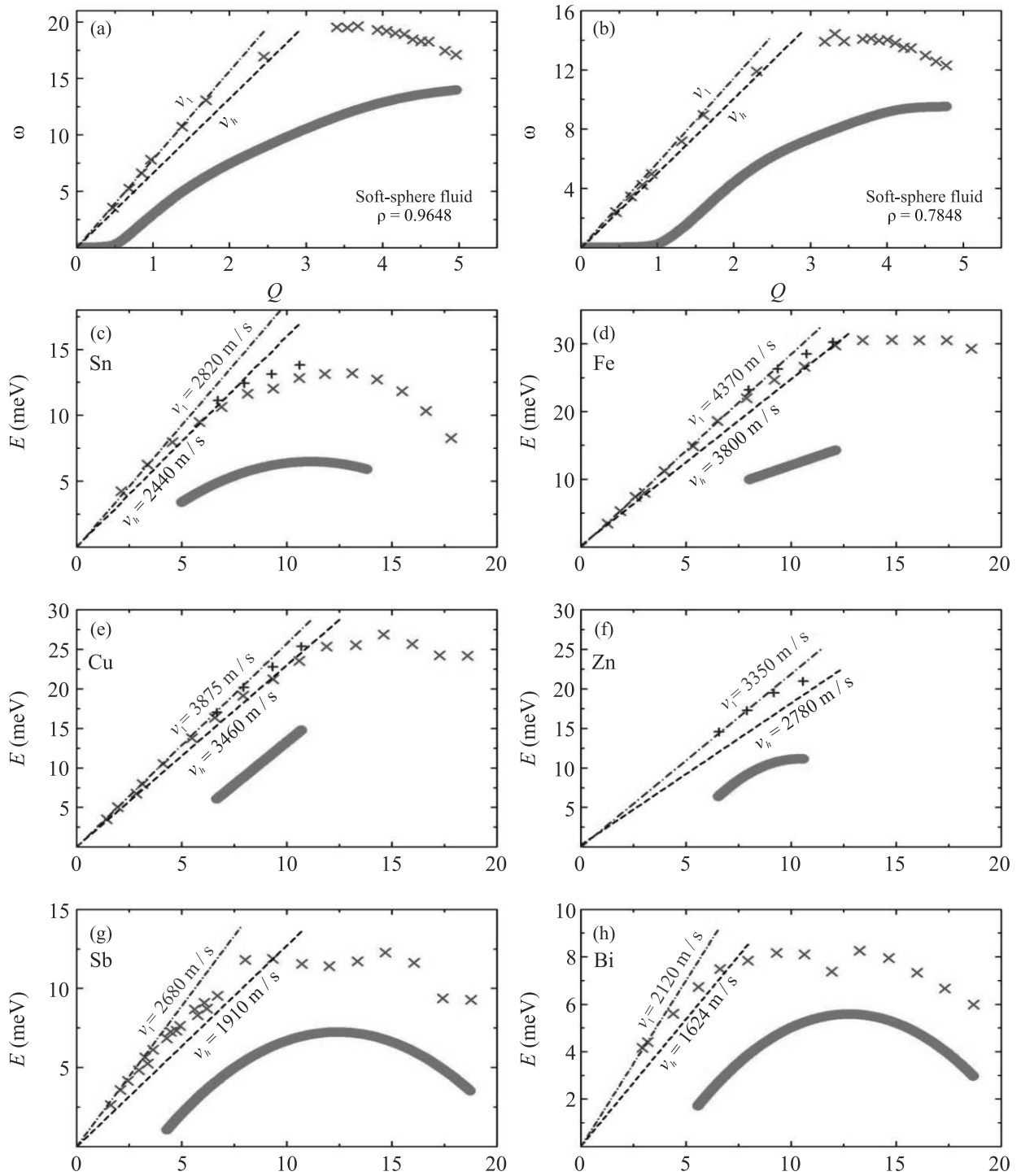


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дисперсионные кривые для продольных и поперечных возбуждений в модельной системе “мягких сфер” (по данным [83]) (a), (b); ряда расплавов металлов (воспроизведено на основе данных работы [87] (см. ссылки в ней)) (c), (f) и полуметаллов (по данным работы [81]) (g), (h). Символы (кресты) – экспериментальные или расчетные данные (разные типы символов соответствуют разным работам). Штриховая линия соответствует гидродинамической скорости звука; штрих-пунктирная – “быстрому” звуку; сплошные кривые (красным цветом онлайн) соответствуют поперечным возбуждениям

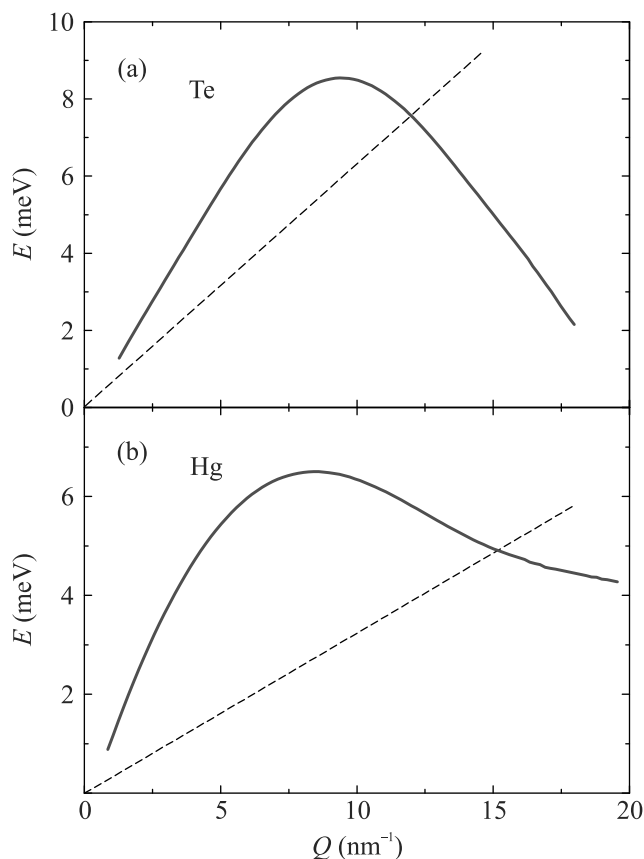


Рис. 3. (Цветной онлайн) Дисперсионные кривые для продольных возбуждений в расплавах Te [10] и Hg [74], демонстрирующие аномальный “быстрый” звук. Штриховые линии соответствуют гидродинамической скорости звука в данных расплавах

Для ранее сделанных оценок мы молчаливо предполагали, что частотная зависимость модулей достаточно слабая и для оценок ею можно пренебречь. Очевидно, что в случае размытых фазовых превращений в жидкостях – это не так. Как уже говорилось, модуль сдвига дает вклад в “быстрый” звук, не превышающий 30–40 %, следовательно, для объяснения большей величины фактора превышения “быстрого” звука V_l/V_h в аномальных жидкостях необходимо предположить очень сильную частотную зависимость объемного модуля сжатия. Как мы покажем ниже, такое поведение модуля может иметь место, более того, оно известно и хорошо изучено в случае размытых структурных превращений в стеклах. Размытые превращения в жидкостях происходят в определенном интервале P , T -параметров, поэтому при существенном изменении P , T -условий аномальные жидкости должны стать “нормальными”. Для воды и для теллура были проведены исследования “быстрого” звука в широком интервале температур и давлений [10] (см. рис. 4). В ранних работах по исследованию

дованию воды отмечалось, что величина Q -гар значительно растет с ростом температуры до 500 К (см. рис. 4а), что явилось сильным аргументом в пользу вязко-упругой модели [73, 76]. В то же время значительное уменьшение фактора превышения скорости “быстрого” звука до “нормальных” значений ~ 1.3 в данных работах не обсуждалось. Аналогичное возвращение к “нормальным” значениям ~ 1.2 для фактора V_l/V_h наблюдалось с ростом температуры и для расплава теллура (см. рис. 4б). Это связывалось с металлизацией расплава и с уменьшением флуктуаций плотности [10]. Недавно высокочастотный звук в воде был исследован в более широкой области температур от 300 до 800 К, включая область параметров вблизи критической точки жидкость–газ [75] (см. рис. 4с). Обнаружено, что отношение V_l/V_h продолжает уменьшаться при нагревании выше 500 К и в диапазоне от 540 до 620 К становится равным 1 (см. рис. 4с). Температура на линии Френкеля для воды при данных давлениях (60 МПа) составляет примерно 510 К [92], таким образом, при более высоких температурах сдвиговая жесткость во флюиде воды отсутствует на всех доступных частотах, и скорость продольного звука дается формулой $V_l(\omega) = (B(\omega)/\rho)^{1/2}$. Можно сделать вывод, что в диапазоне от 540 до 620 К частотная зависимость $B(\omega)$ довольно слабая и “быстрый” звук сравнивается с гидродинамическим. При дальнейшем росте температуры фактор V_l/V_h вновь возрастает до больших значений 1.5–1.6 (см. рис. 4с). Поскольку при этих температурах вклада от сдвигового модуля быть не может, очевидно, что в окрестности критической точки наблюдается сильная частотная зависимость модуля объемного сжатия $B(\omega)$.

Можно заметить, что рост фактора V_l/V_h при нагревании выше 520 К происходит не за счет роста скорости “быстрого” звука, а за счет уменьшения по величине гидродинамической скорости. Это же наблюдается и для расплава ртути (рис. 3б). Скорость “быстрого” звука вблизи области перехода металл–диэлектрик почти такая же, как при нормальных условиях, в то время как гидродинамическая скорость звука в 3 раза меньше. Очевидно, что как для воды, так и для ртути малая скорость низкочастотного звука при высоких температурах связана с близостью критической точки жидкость–газ, вблизи которой, как известно, наблюдается критическое поведение (расходимость) многих величин, в том числе и сжимаемости. Следовательно, большое отношение V_l/V_h обусловлено не аномально большой величиной “быстрого” звука, а аномально малыми значениями низкочастотного модуля объемного сжатия и

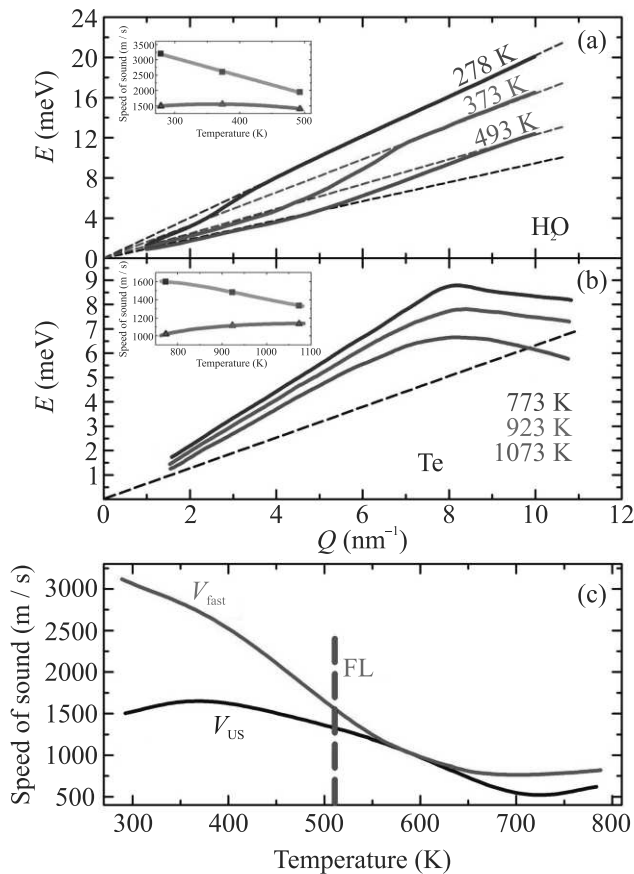


Рис. 4. (Цветной онлайн) Дисперсионные кривые для продольных возбуждений при различных температурах в воде (а) (по данным [73, 76]), расплаве теллура [10] (б) и температурные зависимости скоростей “быстрого” и “нормального” звука в воде (по данным [73, 75, 76]) (с). Штриховые линии соответствуют гидродинамическому звуку; штрих-пунктирные на панели (а) – “быстрому” звуку в воде; на вставках на панелях (а) и (б) показаны температурные зависимости “быстрого” (верхняя кривая) и “нормального” звука в жидкостях. Температурные зависимости на панели (с) приведены в широком температурном диапазоне, включая окологритическую область жидкость-газ при максимальных температурах. Вертикальной штриховой линией указано положение линии Френкеля для воды по данным [92]

гидродинамической скорости звука. Можно предположить, что и при низких температурах для воды и теллура большие значения фактора V_l/V_h связаны с аномально малыми значениями модуля сжатия на низких частотах. Таким образом, в аномальных жидкостях наблюдается не необычный “быстрый” звук, а аномально медленный гидродинамический звук. Как мы покажем ниже, это связано с уменьшением релаксирующих модулей сжатия на низких частотах.

3. Релаксирующие модули объемного сжатия в стеклах под давлением. Как говорилось во введении, во многих стеклах под давлением наблюдаются размытые структурные превращения. Прецизионная тензометрическая методика измерения геометрических размеров образцов под давлением позволила нам получить очень точные данные по барическим зависимостям плотности стекол [62]. Модуль объемного сжатия можно получить простым дифференцированием по точкам экспериментальных кривых [49–60], что невозможно при других более грубых измерениях объема стекол. В тензометрическом эксперименте характерные времена возбуждения релаксирующего поведения в отрелаксированном стекле составляют сотни секунд, в результате нами измеряется низкочастотный изотермический модуль объемного сжатия (на частотах в тысячные доли герца и ниже). В других методах измерения модуля сжатия (ультразвуковая методика, бриллюэновское рассеяние) модуляция давления происходит на частотах от мегагерц до сотен гигагерц, соответственно, получаемая информация относится к адиабатическим упругим модулям стекол на этих частотах. Уже первые исследования оксидных стекол с помощью тензометрической методики показали, что в окрестности размытого фазового превращения модуль сжатия на низких частотах (мы будем называть его “релаксирующим”) может быть в несколько раз меньше модуля на высоких частотах, полученного из данных ультразвуковых измерений или из данных по бриллюэновскому рассеянию [49, 50, 93] (см. рис. 5). Причина этого вполне проста. Элементарный акт релаксации при размытом фазовом превращении на микроуровне заключается в перегруппировке небольшой группы атомов или молекул [61, 93]. В рамках упрощенной модели “двухкомпонентного” стекла с двумя возможными типами ближнего или промежуточного порядка такая перегруппировка соответствует просто изменению взаимной концентрации компонентов. Перегруппировка атомов требует преодоления определенного энергетического барьера и происходит за определенные времена, зависящие от P, T -условий. Если эти времена существенно меньше времени изменения давления и измерения объема или модуля, то неупругие процессы релаксации успевают происходить и релаксирующий модуль сжатия соответствует изменению взаимной концентрации компонентов. При резком фазовом переходе 1-го рода релаксирующий модуль сжатия формально стремится к нулю (бесконечная производная при скачке объема соответствует бесконечной сжимаемости). Если времена перегруппировки атомов

сравнимы или превышают времена изменения давления (например, при модуляции давления в ультразвуковых или бриллюэновских измерениях), то стекло ведет себя почти упруго, как смесь фаз с неизменной концентрацией компонентов. Модуль сжатия при этом будет иметь “мгновенные” значения, промежуточные между модулями модификаций стекла низкого и высокого давления.

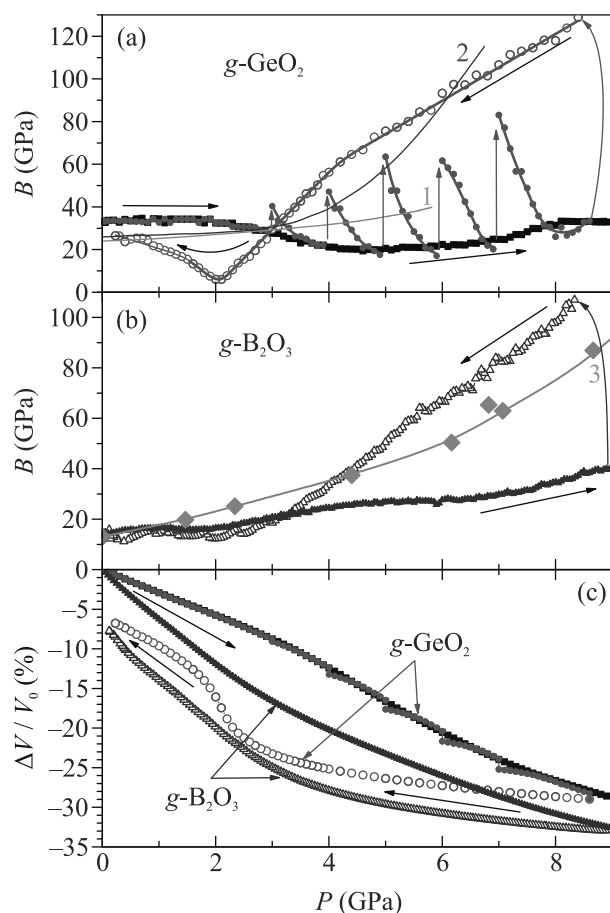


Рис. 5. (Цветной онлайн) Барические зависимости релаксирующего объемного модуля (а), (b) и объема (с) при увеличении (сплошные точки) и уменьшении (открытые точки) гидростатического давления для стекол $g\text{-GeO}_2$ (а), (с) и $g\text{-B}_2\text{O}_3$ (b), (с) по результатам тензометрических измерений [49, 50, 93]. Для сравнения приведены: ультразвуковые данные (1) [94] и результаты пересчета модуля из скоростей звука по данным бриллюэновского рассеяния (2) – [95], (3) – [96]. Черные стрелки указывают направление хода по давлению, цветные стрелки на панелях (а), (b) связывают разрывы на графиках модулей

Исследования показали, что спектр времен релаксации в стеклах очень широкий – от долей секунд до миллиардов секунд [49–60]. В результате,

даже при квазистатических измерениях объема с помощью тензометрической методики часть неупругих процессов не успевает происходить, и при изобарической выдержке наблюдается медленная дополнительная релаксация (логарифмическая по времени). Тем не менее основная часть неупругих процессов в стекле и взаимная концентрация компонентов успевают “отслеживать” изменения давления, что приводит к эффективному сильному уменьшению релаксирующего модуля сжатия. Как уже говорилось, стекла не являются эргодическими системами, и размытые превращения в них происходят вдали от условного термодинамического равновесия. При низких температурах, где диффузионные процессы заморожены, превращение в аморфной сетке будет определяться достижением локальных спинодалей (линий потери устойчивости) для различных участков сетки [37, 61]. При этом, естественно, имеет место большой гистерезис по давлению между прямым и обратным превращением (см. рис. 6).

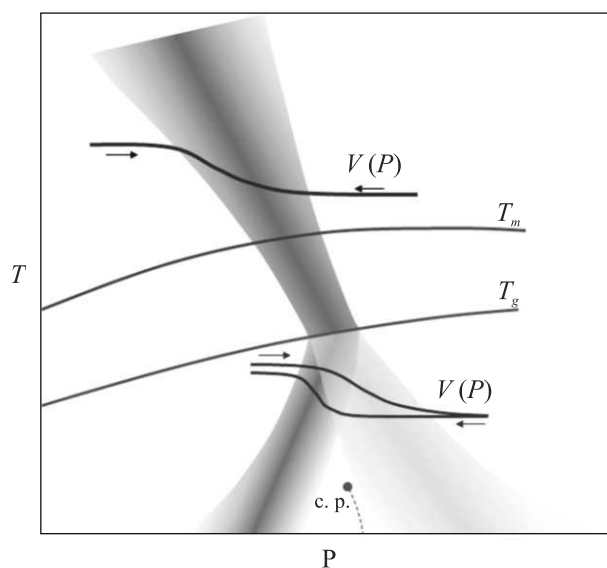


Рис. 6. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма, демонстрирующая возможность размытых структурных превращений в жидком состоянии (верхняя размытая полоса, зеленый цвет – онлайн) и в аморфном состоянии (две нижние размытые полосы, желтого (прямой переход) и синего (обратный переход) цвета онлайн). T_m и T_g – линии плавления и стеклования, соответственно. Показано качественное поведение объема при размытых структурных превращениях в жидкости и стекле. Гипотетическая линия фазового перехода 1-го рода, оканчивающаяся критической точкой (с. п.), находится ниже температуры стеклования и принципиально недоступна для измерений

Этим стекла принципиально отличаются от жидкостей, в которых размытые превращения являются равновесными и на экспериментальных временах могут происходить без гистерезиса. В связи с этим, уменьшение релаксирующего модуля наблюдается только в тех измерениях, где давление меняется “в одну сторону” (подъем давления в области прямого превращения и сброс давления – в области обратного). В следующих параграфах мы обсудим этот момент более детально. При исследовании методом бриллюэновской спектроскопии и при ультразвуковых исследованиях очень короткие времена модуляции давления (от десятков пикосекунд до долей микросекунд) практически не приводят к перегруппировкам атомов, и стекло ведет себя упруго даже в районе размытого структурного перехода. Даже если какая-то малая часть процессов релаксации “успевает” произойти за первые “полуволны” прироста давления, то большой гистерезис между прямым и обратным превращением приводит к тому, что все последующие волны модуляции давления происходят в упругом режиме. Таким образом, расхождение модулей сжатия, полученных из объемных измерений и в волновых методиках, является прямым свидетельством начала неупругих процессов и структурного превращения. Различие по величине изотермического и адиабатического модулей сжатия (для исследованных стекол $\sim 1\%$) [97] сопоставимо с точностью измерений, поэтому в дальнейшем мы им пренебрегаем. Все вышесказанное хорошо иллюстрирует поведение стеклообразного оксида германия (рис. 5а). Точность измерения модулей в ультразвуковой [94] и бриллюэновской [95] методиках в данном случае невысока. Тем не менее, видно, что существенное расхождение в барических зависимостях модуля, полученных при объемных измерениях и в “волновых” методиках, начинается примерно при 1.5–2 ГПа. Далее начинаются неупругие процессы и размытое превращение вплоть до самых высоких давлений. Релаксирующий модуль при этом меньше “мгновенного” в 3–5 раз. После долгой изобарической релаксации при давлениях в диапазоне превращения происходит некоторая часть дополнительных релаксационных процессов и последующий рост давления в первый момент соответствует упругому поведению без изменения “концентрации компонентов”. Величина модуля при этом близка к значениям, полученным в “волновых” измерениях. Дальнейший рост давления ведет к “возвращению” значений модуля к “релаксирующему состоянию”. При сбросе давления в диапазоне от 9 до 4 ГПа наблюдается упругое поведение и большие (“нормальные”) значения моду-

ля. При дальнейшем снижении давления начинается обратное структурное превращение и релаксирующий модуль снова становится существенно меньше (при 2 ГПа – в 6–7 раз) “мгновенного” значения. Аналогично, для стеклообразного оксида бора (рис. 5б) размытое превращение на прямом ходу начинается при давлениях выше 0.5 ГПа, при этом барические зависимости “тензометрического” и “бриллюэновского” модулей начинают сильно различаться. Релаксирующий модуль меньше “мгновенного” в 2–3 раза как при прямом, так и при обратном превращении.

В данных оксидных стеклах под давлением происходит смена как ближнего, так и промежуточного порядка, и “двухкомпонентная” (для $g\text{-B}_2\text{O}_3$ – даже “трехкомпонентная” [93]) модель стекла вполне адекватна. Впоследствии с помощью тензометрической методики было изучено поведение под давлением многих халькогенидных стекол (см. рис. 7, 8). В данных стеклах под давлением происходит лишь изменение промежуточного порядка (типа связности основных структурных единиц аморфной сетки) [53–60]. Вместе с тем, основные черты поведения сжимаемости халькогенидных стекол те же, что и оксидных: наблюдается существенное (в 1.5–2 раза) уменьшение релаксирующего модуля объемного сжатия по сравнению с “мгновенными” значениями. Данные ультразвуковых измерений дают модули, близкие по значениям к “тензометрическим” в упругой области без превращений (особенно – на обратном ходу по давлению (рис. 7а)). Так же как и для оксидных стекол, длительные изобарические выдержки приводят в начале дальнейшего сжатия к росту модулей до “мгновенных” (рис. 8) или промежуточных (рис. 7а) значений модуля.

Итак, при любом размытом структурном превращении будет наблюдаться объемная аномалия, а следовательно, уменьшение релаксирующего модуля объемного сжатия. В рамках упрощенной модели двухкомпонентного стекла (смесь на наноуровне модификаций низкой и высокой плотности) легко сделать оценки соответствующего смягчения модулей. Пусть имеются 2 модификации стекла (или жидкости(!)): a (“рыхлая”) и b (плотная), и x есть концентрация компоненты b при данном давлении в области размытого фазового превращения. Тогда “мгновенная” сжимаемость $\beta_i = (1 - x) \cdot \beta_a + x \cdot \beta_b$ – просто усредненная сжимаемость плотной и “рыхлой” фаз стекол. Дополнительная релаксирующая сжимаемость от изменения взаимной концентрации компонентов $\Delta\beta = \Delta V_{a-b}/V \cdot \partial x/\partial P$, где ΔV_{a-b} – разница удельных объемов плотной и “рыхлой” фаз; $\partial x/\partial P$ – производная концентрации плотной фазы b по давлению.

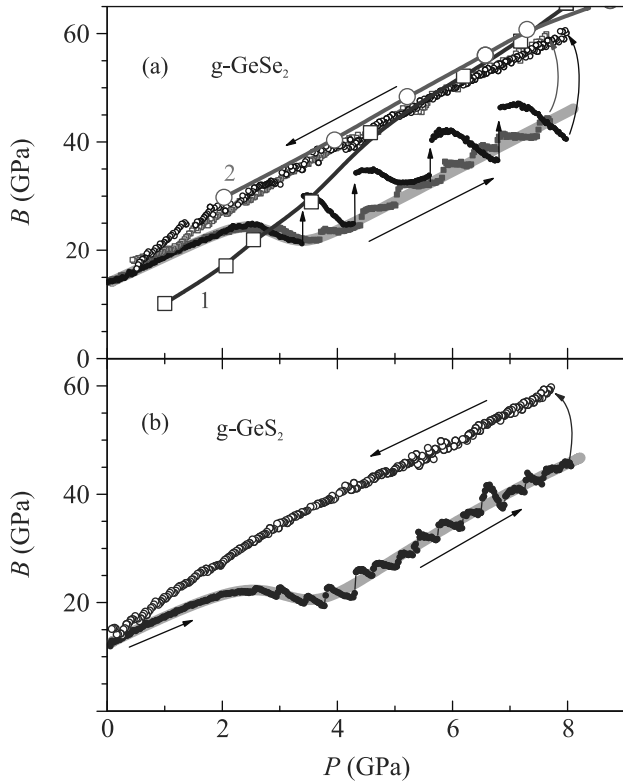


Рис. 7. (Цветной онлайн) Барические зависимости релаксирующего объемного модуля при увеличении (сплошные точки) и уменьшении (открытые точки) гидростатического давления для стекол $g\text{-GeSe}_2$ (a) и $g\text{-GeS}_2$ (b) по результатам тензометрических измерений [53, 60]. Широкие серые линии – усреднение вариаций модуля, обусловленных изменениями скорости роста давления в релаксирующей области структурного перехода. Стрелки показывают направления хода по давлению и связи в точках разрывов графиков модуля. 1 – результаты работы [98], 2 – расчет модуля при уменьшении давления из скоростей звука работы [98] и тензометрической плотности работы [53]

нию. $\partial x/\partial P \approx 1/\Delta P$, где ΔP – эффективная ширина превращения по давлению (реально – полуширина). Суммарно, релаксирующая сжимаемость

$$\beta_r = \beta_i + \Delta\beta \approx (1-x) \cdot \beta_a + x \cdot \beta_b + \Delta V_{a-b}/(V \cdot \Delta P). \quad (3)$$

Соответственно, “мгновенный” модуль объемного сжатия в рамках данной модели $B_i = 1/((1-x) \cdot \beta_a + x \cdot \beta_b)$. Если ввести условную величину $\Delta B = 1/\Delta\beta \approx \Delta P \cdot V/\Delta V_{a-b}$, то для релаксирующего модуля получаем

$$B_r = B_i \cdot \Delta B / (B_i + \Delta B). \quad (4)$$

Если $B_i \gg \Delta B$, то имеем

$$B_r \approx \Delta B \approx \Delta P \cdot V/\Delta V_{a-b}. \quad (5)$$

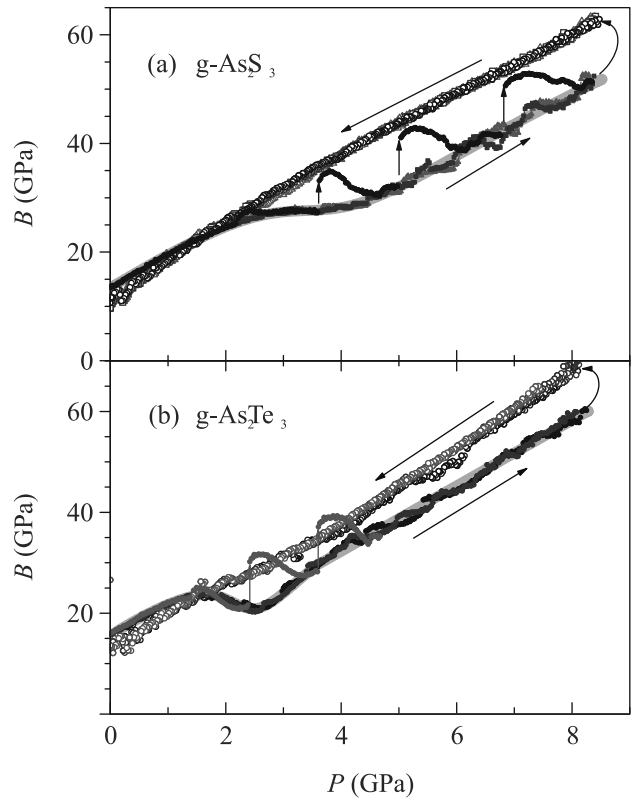


Рис. 8. (Цветной онлайн) Барические зависимости релаксирующего объемного модуля при увеличении (сплошные точки) и уменьшении (открытые точки) гидростатического давления для стекол $g\text{-As}_2\text{S}_3$ (a) и $g\text{-As}_2\text{Te}_3$ (b) по результатам тензометрических измерений [54, 55, 59]. Широкие серые линии – усреднение вариаций модуля, обусловленных изменениями скорости роста давления в релаксирующей области структурного перехода. Стрелки показывают направления хода по давлению и связи в точках разрывов графиков модуля

Из (5) следует и так очевидный вывод, что релаксирующий модуль будет тем меньше, чем меньше ширина превращения по давлению ΔP и чем больше относительный скачок объема между двумя компонентами $\Delta V_{a-b}/V$. Приближенный характер модели с нестрогим определенными параметрами ΔP и ΔV_{a-b} в дополнительных комментариях не нуждается, однако применение формулы (4) к стеклообразному оксиду германия (рис. 5а, с) дает “правильные” значения релаксирующего модуля объемного сжатия в окрестности структурного превращения как при увеличении $B_r \approx 20$ ГПа ($\Delta P \approx 3$ ГПа, $\Delta V_{a-b}/V \approx 0.15$), так и при уменьшении давления $B_r \approx 6$ ГПа ($\Delta P \approx 0.7$ ГПа, $\Delta V_{a-b}/V \approx 0.11$).

4. Релаксирующая сжимаемость в аномальных жидкостях. Очевидно, что в случае размытого фазового превращения в жидкостях все аргумен-

ты предыдущего параграфа о смягчении релаксирующего объемного модуля сжатия и, соответственно, росте релаксирующей сжимаемости остаются в силе. Более того, в отличие от стекол, жидкости выше температуры стеклования на экспериментальных временах являются эргодическими системами и гистерезис по давлению между прямым и обратным превращением, как правило, отсутствует (см. рис. 6). При этом не только прямые измерения объема, но и прямые модуляционные методы измерения модуля сжатия, например, ультразвуковым методом, будут давать релаксирующие значения адиабатического модуля сжатия, если времена элементарных актов релаксации в жидкости существенно меньше времени модуляции давления. Характерные времена данных актов релаксации в невязких жидкостях, таких, как вода или расплав теллура, сравнимы с диффузионными временами релаксации и лежат в пикосекундном диапазоне. Очевидно, что большинство экспериментальных методов измерения будут давать при этом релаксирующие значения модуля сжатия и сжимаемости. Рентгеновский квант в методе неупругого рентгеновского рассеяния создает локальное возмущение плотности и давления на субпикосекундных масштабах [70]. В результате продольная скорость звука будет определяться “мгновенными” значениями модулей сжатия и сдвига. Как говорилось выше, отклонение скорости звука от гидродинамической в воде начинается при значениях волнового вектора $Q \sim 0.1 \text{ нм}^{-1}$ [71], т.е. определенные акты локальной перестройки структуры происходят на временах в десятки пикосекунд. В связи с этим методики бриллюэновского рассеяния и неупругого рассеяния ультрафиолета также могут давать не полностью релаксирующие значения модулей. Спектры времен для обычной релаксации диффузии и локальных актов перестройки структуры в аномальных жидкостях могут перекрываться, но не обязаны совпадать. Рост модуля сжатия, связанный с не полностью релаксирующим модулем, может начинаться при меньших частотах и волновых векторах, нежели появление регистрируемых поперечных волн. По-видимому, именно это обстоятельство приводит к более размытому отклонению дисперсионной кривой для продольных возбуждений от прямой, соответствующей гидродинамической скорости в случае аномальных жидкостей (см. рис. 1).

Таким образом, в отличие от стекол, где в большинстве стандартных “волновых” методик измеряются “мгновенные” значения модулей, в случае аномальных жидкостей, напротив, как правило, измеряются релаксирующие значения модуля сжатия. В

результате, для воды и расплава теллура табличные значения модуля сжатия и сжимаемости, к которым все привыкли, соответствуют низким релаксирующим значениям, а “нормальная” гидродинамическая скорость звука на самом деле является аномально “медленной”! Особенно наглядно “замедление” скорости звука в случае релаксирующего модуля сжатия видно при сравнении скоростей и модулей воды и аморфных льдов (см. рис. 9). Аморфные льды высокой и низкой плотности (hda и lda) были получены с помощью твердофазной аморфизации гексагонального льда $1h$ под давлением (переход $1h \rightarrow hda$) и последующего нагревания аморфного льда высокой плотности при умеренных давлениях (переход $hda \rightarrow lda$) [64–69]. Ультразвуковым методом нами были измерены скорости продольного и поперечного звука для обеих аморфных модификаций льда и вычислены модули объемного сжатия и сдвига (см. рис. 9). Очевидно, что при этом измеряются “мгновенные” значения скоростей звука и модулей. Модули объемного сжатия аморфных льдов в 4–5 раз превышают по величине модуль сжатия воды (см. рис. 9b)! Удивительно, но на этот факт также ранее не обращалось внимания. Считается, что структура ближнего и промежуточного порядка воды базируется на тех же элементах, что и hda , lda – аморфных льдов, поэтому “мгновенные” значения модулей сжатия для воды и аморфных льдов должны быть близки. При высоких температурах при давлениях выше критического размытое превращение в воде более не наблюдается, и температурные зависимости скоростей звука и модулей имеют “нормальный” характер, близкий к линейному (см. рис. 9a). Как видно из рис. 9a, экстраполяция высокотемпературного линейного участка зависимости гидродинамической скорости звука в воде приводит к значениям на 30–35 % ниже значений продольной скорости звука в аморфных льдах и скорости “быстрого” звука в воде. Как говорилось выше, такое различие типично для обычных жидкостей и связано с вкладом от сдвигового модуля в значение скорости “быстрого” звука. Такой же вклад в продольную скорость наблюдается от сдвиговой компоненты и для аморфных льдов (см. рис. 9a). Таким образом, если бы в воде не было размытого структурного превращения, гидродинамическая скорость звука в ней соответствовала бы штриховой кривой на рис. 9a. Это хорошо иллюстрируется сравнением с условной скоростью звука в аморфных льдах по “жидкостной” формуле без учета сдвиговой составляющей $V^* = (B/\rho)^{1/2}$ (см. рис. 9a, коричневые кривые).

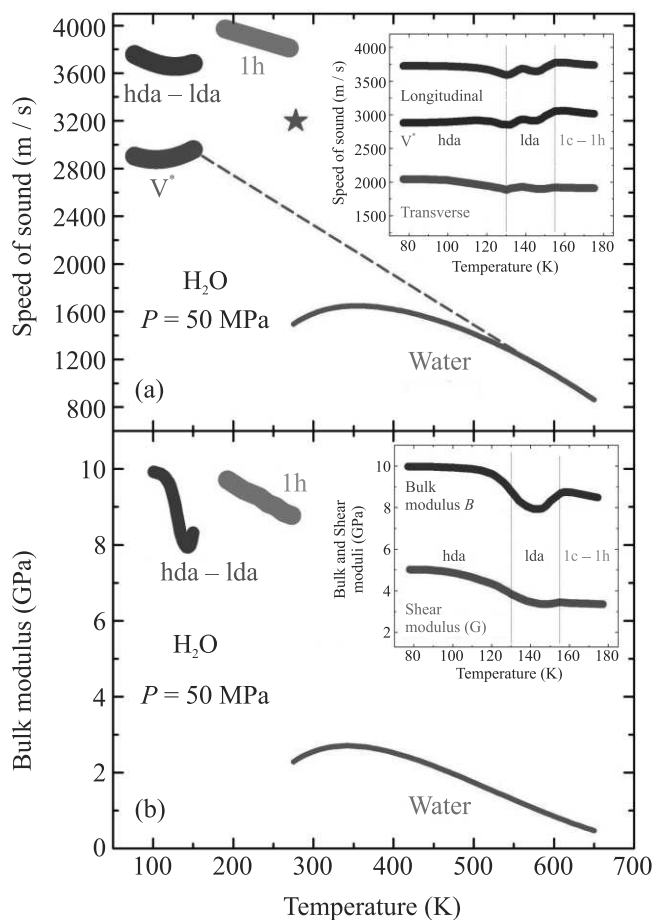


Рис. 9. (Цветной онлайн) Скорости звука (а) и упругие модули (б) для воды и аморфных льдов низкой и высокой плотности. На панели (а) представлены изобарические температурные зависимости гидродинамической скорости звука в воде по данным [99]; температурные зависимости продольной скорости звука для аморфных льдов lda и hda по данным [64–69]; для кристаллического льда lh [100]. Также показана условная скорость $V^* = (B/\rho)^{1/2}$ для аморфных льдов (коричневый цвет онлайн). Штриховой линией показана линейная экстраполяция гидродинамической скорости для воды в область низких температур. Звездочка соответствует значению скорости “быстрого” звука в воде. На вставке к панели (а) температурные зависимости скоростей продольного, поперечного звука и условной скорости V^* для аморфных льдов представлены более детально. На панели (б) показаны соответствующие температурные зависимости объемного модуля сжатия для воды, аморфных льдов и кристаллического льда. На вставке к панели (б) приведены температурные зависимости модулей объемного сжатия и сдвига для аморфных и кристаллических льдов

Температурная зависимость модуля объемного сжатия воды при высоких температурах имеет слегка вогнутый характер (см. рис. 9б), однако малый

интервал температур не позволяет сделать надежную экстраполяцию в низкотемпературную область существования аморфных льдов. Тем не менее, общий вывод остается в силе: причина сильного различия модуля сжатия воды и аморфных льдов – это размытое структурное превращение и релаксирующие значения модуля и скорости звука для воды в большинстве методов измерения.

5. Аномальные значения физических характеристик, размытые превращения и критические явления. Размытые фазовые превращения в неупорядоченных средах (жидкости, стекла, аморфные твердые тела) приводят не только к аномальным температурным и барическим зависимостям многих физических свойств, но и к аномальным абсолютным значениям ряда характеристик. Помимо аномально низких значений модуля сжатия и, соответственно, скорости звука в аномальных жидкостях, также должны наблюдаться аномально высокие значения удельной теплоемкости. Действительно, изменение взаимной концентрации компонентов при размытом превращении является дополнительным каналом затрат энергии при нагревании. Аналогично рассмотрению релаксирующего модуля для релаксирующей теплоемкости можно записать

$$C_r = C_i + (\partial E / \partial x)(\partial x / \partial T) \approx C_i + \Delta E_{A-C} / \Delta T, \quad (6)$$

где C_r – релаксирующая теплоемкость, C_i – “мгновенная” теплоемкость, ΔE_{A-C} – разница потенциальных энергий между двумя состояниями в жидкости, ΔT – эффективная ширина превращения по температуре. Так же, как и для релаксирующей сжимаемости, чем уже интервал превращения, тем больше вклад в теплоемкость (при резком фазовом переходе теплоемкость в точке перехода стремится к бесконечности). Аномально высокая теплоемкость воды уже свыше 100 лет является предметом активного обсуждения. При нормальных условиях изохорическая теплоемкость $C_v \approx 75$ Дж/моль · К [99], что в 2 раза выше теплоемкости льда и составляет $9k_B$ в расчете на молекулу или $3k_B$ в расчете на атом (k_B – постоянная Больцмана). Таким образом, с точки зрения теплоемкости вода себя ведет как твердое тело из $3N$ частиц (все внутримолекулярные колебания возбуждены). Расплав теллура также имеет аномально высокую теплоемкость – $C_v \approx 42$ Дж/моль · К при температуре плавления и $C_v \approx 55$ Дж/моль · К в переохлажденном состоянии при 630 К [11, 101]. Это в 1.7 и 2.2 раза соответственно превышает величину $3k_B$ в расчете на атом теллура. Превышение релаксирующей теплоемкости по сравнению с “мгновенной” на 20–30 Дж/моль · К при эффективной ширине

превращения по температуре ~ 100 К соответствует вполне разумным значениям разницы энергий между двумя состояниями в двухкомпонентной модели $\Delta E_{A-C} \sim 0.02-0.03$ эВ/атом.

При “отходе” от зоны размытого превращения по температуре и (или) давлению не только температурные и барические зависимости физических свойств, но и их абсолютные величины становятся “нормальными” (см. рис. 10). На этом рисунке приведены температурные зависимости модулей объемного сжатия теллура и селена – “нормального” соседа теллура по периодической системе, а также температурная зависимость теплоемкости воды на изохоре в сравнении с зависимостями для “нормальных” флюидов CH_3OH и CO_2 . Видно, что при высоких температурах модуль сжатия расплава теллура вырастает в полтора раза с намечающейся тенденцией перехода к нормальному поведению в области значительно более высоких температур. Аналогично, теплоемкость воды при высоких температурах падает в полтора раза, в то время как в “нормальных” флюидах наблюдается рост теплоемкости, обусловленный возбуждением внутримолекулярных колебаний.

В отличие от измерения модулей на терагерцовых частотах методом неупругого рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов, методики измерения “мгновенной” теплоемкости на субпикосекундных временах отсутствуют. В результате все методики измерения дают для аномальных жидкостей релаксирующие значения теплоемкости. В то же время, технически реальные импульсные методики измерения теплоемкости в субмикросекундном диапазоне времен (см., например, [102]) потенциально могут обнаружить заметные отличия “мгновенных” значений теплоемкости от релаксирующих в случае размытых превращений в вязких расплавах и стеклах. Специфика исследований теплоемкости и энтропии для стекол обсуждалась нами в [103]. В случае размытых превращений в вязких жидкостях “мгновенные” значения сжимаемости также можно получить при использовании модуляционных методик измерения (бриллюэновское рассеяние, ультразвуковые исследования на субгигагерцовых частотах). Поскольку такие превращения происходят, как правило, при высоких давлениях, экспериментально такие измерения очень трудоемки. Более реалистично получить данные по “мгновенной” теплоемкости и сжимаемости методами компьютерного моделирования.

В недавней работе [75], как и в ряде предыдущих работ этих же авторов [10, 74], “аномальность” “быстрого” звука (большая величина фактора V_i/V_h) в аномальных жидкостях связывалась с близостью

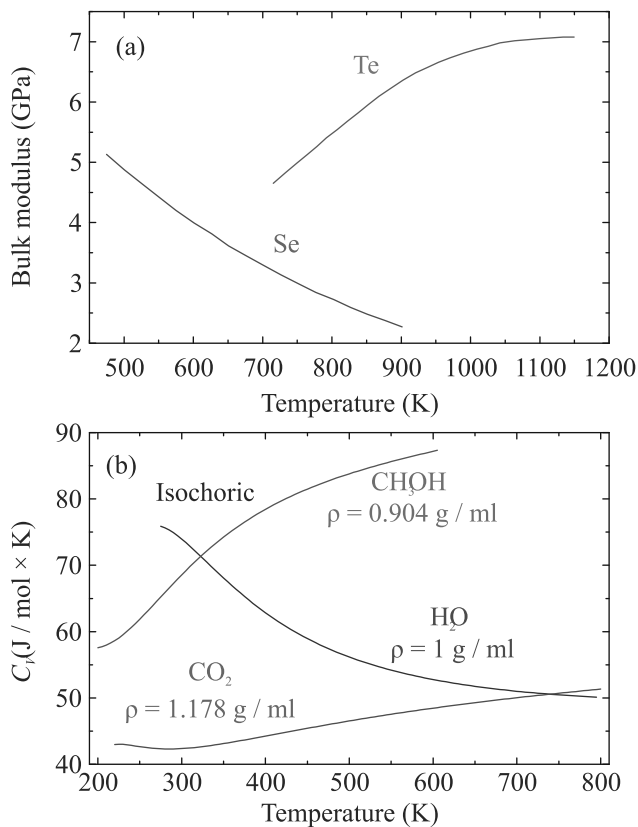


Рис. 10. (Цветной онлайн) Сравнение модулей объемного сжатия (а) и теплоемкости (б) для аномальных и “нормальных” жидкостей. Данные по модулям сжатия расплавов теллура и селена рассчитаны на основе результатов работы [8]; теплоемкость жидкостей на изохорах на панели (б) взята из [99]

к гипотетической критической точке для фазового перехода жидкость–жидкость. Делалось это в значительной степени по аналогии с поведением флюидов вблизи критической точки жидкость–газ. Вблизи критической точки, как и вблизи точки фазового перехода 2-го рода, наблюдается нарастание флуктуаций многих характеристик, в том числе флуктуаций плотности. Именно с критическими флуктуациями авторы [75] связывают релаксационные процессы, приводящие к аномально большому “быстрому” звуку. При этом отношение V_i/V_h рассматривается как “сила релаксации” (“relaxation strength”), определяющая близость к критической точке [75]. На наш взгляд, это не совсем верно, и аномальное большое значение величины V_i/V_h может наблюдаться при размытых превращениях в жидкостях независимо от того, существует ли “настоящий” фазовый переход с критической точкой или нет.

Действительно, как было показано выше, для большой величины отношения V_i/V_h достаточно на-

личия двух типов локальных структур в жидкости и изменения их концентрации при изменении P, T -параметров. Рост отношения V_l/V_h при этом определяется уменьшением значения релаксирующей гидродинамической скорости и никак не связан с критическими флуктуациями. Следует заметить, что фазовый переход жидкость–жидкость во многих аспектах кардинально отличается от перехода жидкость–газ. Как отмечалось нами еще в первых работах, основным параметром порядка при переходах в жидкости выступает взаимная концентрация компонентов (нано-областей с различным ближним и промежуточным порядком), а объем (плотность) является вторичным “вспомогательным” параметром порядка [29, 47]. Сейчас концепция двухкомпонентного параметра порядка (взаимная концентрация разных локальных структур и плотность) стала общепринятой [48]. На линии фазового перехода 1-го рода в жидкости эта концентрация меняется скачком, но она ненулевая для обоих компонентов по обе стороны от перехода. В критической области скачок концентрации обращается в нуль, но оба типа локальных структур присутствуют и в закритической области. Это кардинально отличает данное превращение от кипения, где по обе стороны от линии перехода существуют либо жидкость, либо газ, а в закритической области – это однородный флюид. Все околоскритические аномалии в обоих случаях могут иметь место лишь в ближайшей окрестности критической точки, там, где отклонения по температуре, давлению и плотности от критических параметров существенно меньше самих критических параметров [104]. При этом для перехода жидкость–жидкость будет наблюдаться рост флуктуаций не только плотности, но и концентрации компонентов. Экспериментальные исследования воды и расплава теллура действительно показывают, что малые изменения в структурном факторе жидкостей, связанные, предположительно, с ростом флуктуаций, наблюдаются лишь в переохлажденном состоянии в узкой области температур [11, 75]. Там же наблюдается дополнительный рост теплоемкости. При этом сами авторы отмечают, что масштаб эффектов, связанных с критическими флуктуациями, в сотни раз меньше, чем вблизи критической точки жидкость–газ [75]. Более того, и для воды, и для расплава теллура большая величина отношения V_l/V_h наблюдается в широкой области температур выше температуры плавления, где никаких критических аномалий не наблюдается и не может наблюдаться. Это резко контрастирует с поведением вблизи критической точки жидкость–газ, где все критические аномалии и большие значения величины V_l/V_h скор-

релированы между собой и имеют место лишь вблизи критической точки [75]. При размытых структурных превращениях в жидкостях сильный рост по величине релаксирующих значений теплоемкости, сжимаемости и отношения V_l/V_h будет наблюдаться независимо от того, имеется ли для этих превращений на фазовой диаграмме продолжение в виде перехода 1-го рода с критической точкой или же превращения происходят как плавный кроссовер при любых P, T -параметрах. Для превращений жидкость–жидкость главным аспектом является наличие двух и более типов локальных структур в широкой P, T -области, а наличие фазового перехода 1-го рода зависит от системы и является в определенном смысле второстепенным. При этом критическая точка может находиться в области стабильности жидкой фазы (как в случае расплавов селена и фосфора), в области метастабильной переохлажденной жидкости (гипотетически – в воде), либо вообще ниже температуры стеклования (как на рис. 6) или при отрицательных давлениях (т.е., как правило, экспериментально недостижима). Конечно, при наличии критической точки жидкость–жидкость в экспериментально достижимой области при P, T -параметрах, близких к критическим, будет наблюдаться дополнительный рост теплоемкости, релаксирующей сжимаемости и отношения V_l/V_h . Однако большие значения величины V_l/V_h , наблюдаемые экспериментально для воды и расплава теллура, никакого отношения к существованию или отсутствию критической точки и фазового перехода 1-го рода в этих жидкостях не имеют.

Закключение. Таким образом, нами было показано, что так называемые аномальные жидкости (вода, расплавы Te, Se-Te, Ga-Te, Ge-Te и др.) имеют не только необычное поведение температурных и барических зависимостей многих физических свойств, но и аномальные абсолютные значения для ряда физических характеристик. Причиной этого является наличие нескольких типов локальных структур в данных жидкостях и изменение взаимной концентрации этих структур при изменении температуры и (или) давления (размытые структурные превращения). В результате, теплоемкость и сжимаемость таких жидкостей являются аномально высокими, а скорость звука в них – аномально низкой по сравнению с жидкостями, не испытывающими размытых структурных превращений. Как следствие, вода имеет сжимаемость в 4–5 раз выше, чем аморфные модификации льда. Аномально высокая сжимаемость наблюдается и при размытых структурных превращениях в стеклах, но, в отличие от жидкостей, лишь при прямых

измерениях объема на больших временах. На пикосекундных и субпикосекундных временах в аномальных жидкостях измерения дают “мгновенные” значения скорости звука и модуля объемного сжатия, сильно превышающие низкочастотные релаксирующие значения. Именно это обстоятельство приводит к аномальному “быстрому” звуку в таких жидкостях. “Быстрый” звук в обычных жидкостях почти полностью определяется вкладом сдвиговой жесткости на высоких частотах. В аномальных жидкостях основной вклад в “быстрый” звук связан с сильной частотной зависимостью объемного модуля сжатия (его резким уменьшением с понижением частоты). “Медленный” звук, большие значения теплоемкости и сжимаемости в аномальных жидкостях не связаны непосредственно с наличием или отсутствием фазового перехода 1-го рода, оканчивающегося критической точкой, и имеют место при любом сценарии размытых структурных превращений.

Авторы выражают благодарность В. Н. Рыжову и К. Траченко за полезные дискуссии и обсуждение результатов, а также благодарят Российский научный фонд за финансовую поддержку (Грант РНФ # 19-12-00111).

1. https://water.lsbu.ac.uk/water/water_anomalies.html.
2. P. Gallo, K. Amann-Winkel, C. Angell et al. (Collaboration), *Chem. Rev.* **116**, 7463 (2016).
3. W. C. Röntgen, *Ann. Phys. Chem.* **281**, 91 (1892).
4. P. Poole, F. Sciortino, U. Essman, and H. E. Stanley, *Nature* **360**, 324 (1992).
5. C. Huang, K. T. Wikfeldt, T. Tokushima et al. (Collaboration), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106**, 15214 (2009).
6. A. K. Soper, *Pure Appl. Chem.* **82**, 1855 (2010).
7. F. Kakinuma, T. Okada, and S. Ohno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 284 (1986).
8. K. Takimoto and H. Endo, *Phys. Chem. Liq* **12**, 141 (1982).
9. Y. Kajihara, M. Inui, K. Ohara, and K. Matsuda, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 274001 (2020).
10. Y. Kajihara, M. Inui, S. Hosokawa, K. Matsuda, and A. Q. R. Baron, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 494244 (2008).
11. Y. Kajihara, M. Inui, K. Matsuda, and K. Ohara, *arXiv:2201.10065*.
12. Y. Kajihara, M. Inui, K. Matsuda, T. Nagao, and K. Ohara, *Phys. Rev. B* **86**, 214202 (2012).
13. Y. Tsuchiya, *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 3163 (1991).
14. M. Kassem, C. Benmore, T. Usuki, K. Ohara, A. Tverjanovich, M. Bokova, V. V. Brazhkin, and E. Bychkov, *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 10843 (2022).
15. V. V. Brazhkin, S. V. Popova, and R. N. Voloshin, *High Press. Res.* **15**, 267 (1997).
16. Е. Ю. Тонков, *Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении*, Наука, Главная редакция физико-математической литературы, М. (1979), 192 с.
17. D. A. Young, *Phase diagrams of the elements*, California Univ., Livermore (USA), Lawrence Livermore Lab (1975).
18. E. Rapoport, *J. Chem. Phys.* **46**, 2891 (1967).
19. E. Rapoport, *J. Chem. Phys.* **48**, 1433 (1968).
20. С. М. Стишов, *УФН* **96**, 467 (1968).
21. L. I. Aptekar, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **249**, 1099 (1979).
22. E. G. Ponyatovsky, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 6123 (2003).
23. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, and S. V. Popova, *JETP Lett.* **50**, 424 (1989).
24. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, and S. V. Popova, *High Press. Res.* **4**, 348 (1990).
25. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *Phys. Lett. A* **154**, 413 (1991).
26. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *High Press. Res.* **6**, 363 (1991).
27. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *High Press. Res.* **10**, 454 (1992).
28. R. N. Voloshin, V. V. Brazhkin, and S. V. Popova, *High Press. Res.* **13**, 51 (1994).
29. V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin, S. V. Popova, and R. N. Voloshin, *New types of phase transitions: phenomenology, concepts, and terminology*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands (2002).
30. V. V. Brazhkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 1419 (1992).
31. A. G. Umnov, V. V. Brazhkin, S. V. Popova, and R. N. Voloshin, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 1427 (1992).
32. A. G. Umnov and V. V. Brazhkin, *High Temp.-High Press.* **25**, 221 (1994).
33. Y. Katayama, T. Mizutani, W. Utsumi, O. Shimomura, M. Yamakata, and K. Funakoshi, *Nature* **403**, 170 (2000).
34. Y. Katayama, Y. Inamura, T. Mizutani, M. Yamakata, W. Utsumi, and O. Shimomura, *Science* **306**, 848 (2004).
35. G. Monaco, S. Falconi, W. A. Crichton, and M. Mezouar, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 255701 (2003).
36. L. Henry, M. Mezouar, G. Garbarino, D. Sifre, G. Weck, and F. Datchi, *Nature* **584**, 382 (2020).
37. V. V. Brazhkin and A. G. Lyapin, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 6059 (2003).
38. V. V. Brazhkin, Y. Katayama, Y. Inamura, M. V. Kondrin, A. G. Lyapin, S. V. Popova, and R. N. Voloshin, *JETP Lett.* **78**, 393 (2003).

39. V.V. Brazhkin, Y. Katayama, A.G. Lyapin, and H. Saitoh, *Phys. Rev. B* **89**, 104203 (2014).
40. V.V. Brazhkin, A.G. Lyapin, S.V. Popova, Y. Katayama, H. Saitoh, and W. Utsumi, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 246104 (2007).
41. V.V. Brazhkin, Y. Katayama, M.V. Kondrin, T. Hattori, A.G. Lyapin, and H. Saitoh, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 145701 (2008).
42. V.V. Brazhkin, M. Kanzaki, K. Funakoshi, and Y. Katayama, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 115901 (2009).
43. V.V. Brazhkin, Y. Katayama, M.V. Kondrin, A.G. Lyapin, and H. Saitoh, *Phys. Rev. B* **82**, 140202 (2010).
44. V.V. Brazhkin, I. Farnan, K. Funakoshi, M. Kanzaki, Y. Katayama, A.G. Lyapin, and H. Saitoh, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 115701 (2010).
45. T. Hattori, T. Kinoshita, T. Narushima, K. Tsuji, and Y. Katayama, *Phys. Rev. B* **73**, 054203 (2006).
46. K. Fuchizaki, N. Hamaya, and Y. Katayama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 033003 (2013).
47. V.V. Brazhkin and A.G. Lyapin, *JETP Lett.* **78**, 542 (2003).
48. H. Tanaka, *J. Chem. Phys.* **153**, 130901 (2020).
49. O.B. Tsiok, V.V. Brazhkin, A.G. Lyapin, and L.G. Khvostantsev, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 999 (1998).
50. V.V. Brazhkin, Y. Katayama, K. Trachenko, O.B. Tsiok, A.G. Lyapin, E. Artacho, M. Dove, G. Ferlat, Y. Inamura, and H. Saitoh, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 035702 (2008).
51. T. Loerting, V.V. Brazhkin, and T. Morishita, *Adv. Chem. Phys.* **143**, 29 (2009).
52. V.V. Brazhkin, E. Bychkov, and O.B. Tsiok, *J. Phys. Chem. B* **120**, 358 (2016).
53. V.V. Brazhkin, E. Bychkov, and O.B. Tsiok, *JETP* **123**, 308 (2016).
54. V.V. Brazhkin, E. Bychkov, and O.B. Tsiok, *Phys. Rev. B* **95**, 054205 (2017).
55. V.V. Brazhkin, E. Bychkov, and O.B. Tsiok, *JETP* **125**, 451 (2017).
56. V.V. Brazhkin and O.B. Tsiok, *Phys. Rev. B* **96**, 134111 (2017).
57. O.B. Tsiok and V.V. Brazhkin, *JETP* **127**, 1118 (2018).
58. E. Soignard, O.B. Tsiok, A.S. Tverjanovich, A. Bychkov, A. Sokolov, V.V. Brazhkin, C.J. Benmore, and E. Bychkov, *J. Phys. Chem. B* **124**, 430 (2020).
59. V.V. Brazhkin, E. Bychkov, A.S. Tver'yanovich, and O.B. Tsiok, *JETP* **130**, 571 (2020).
60. O.B. Tsiok, V.V. Brazhkin, A.S. Tverjanovich, and E. Bychkov, *JETP* **134**, 51 (2022).
61. V.V. Brazhkin, A.G. Lyapin, O.V. Stalgorova, E.L. Gromnitskaya, S.V. Popova, and O.B. Tsiok, *J. Non. Cryst. Solids* **212**, 49 (1997).
62. O.B. Tsiok, V.V. Bredikhin, V.A. Sidorov, and L.G. Khvostantsev, *High Press. Res.* **10**, 523 (1992).
63. O. Mishima, L.D. Calvert, and E. Whalley, *Nature* **310**, 393 (1984).
64. O.V. Stal'gorova, E.L. Gromnitskaya, V.V. Brazhkin, and A.G. Lyapin, *JETP Lett.* **69**, 694 (1999).
65. E.L. Gromnitskaya, O.V. Stal'gorova, V.V. Brazhkin, and A.G. Lyapin, *Phys. Rev. B* **64**, 094205 (2001).
66. A.G. Lyapin, O.V. Stal'gorova, E.L. Gromnitskaya, and V.V. Brazhkin, *JETP* **94**, 283 (2002).
67. E.L. Gromnitskaya, O.V. Stal'gorova, A.G. Lyapin, V.V. Brazhkin, and O.B. Tarutin, *JETP Lett.* **78**, 488 (2003).
68. E.L. Gromnitskaya, A.G. Lyapin, O.V. Stalgorova, I.V. Danilov, and V.V. Brazhkin, *JETP Lett.* **96**, 789 (2013).
69. E.L. Gromnitskaya, I.V. Danilov, A.G. Lyapin, and V.V. Brazhkin, *Phys. Rev. B* **92**, 134104 (2015).
70. T. Scopigno, G. Ruocco, and F. Sette, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 881 (2005).
71. S.C. Santucci, D. Fioretto, L. Comez, A. Gessini, and C. Masciovecchio, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 225701 (2006).
72. F. Gorelli, M. Santoro, T. Scopigno, M. Krisch, and G. Ruocco, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 245702 (2006).
73. G. Ruocco and F. Sette, *Condens. Matter Phys.* **11**, 29 (2008).
74. D. Ishikawa, M. Inui, K. Matsuda, K. Tamura, S. Tsutsui, and A.Q.R. Baron, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 097801 (2004).
75. Y. Kajihara, M. Inui, K. Matsuda, D. Ishikawa, S. Tsutsui, and A.Q.R. Baron, *Phys. Rev. Research* **5**, 013120 (2023).
76. A. Cunsolo, G. Ruocco, F. Sette, C. Masciovecchio, A. Mermet, G. Monaco, M. Sampoli, and R. Verbeni, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 775 (1999).
77. A. Cunsolo, G. Pratesi, R. Verbeni, D. Colognesi, C. Masciovecchio, G. Monaco, G. Ruocco, and F. Sette, *J. Chem. Phys.* **114**, 2259 (2001).
78. F. Bencivenga, A. Cunsolo, M. Krisch, G. Monaco, G. Ruocco, and F. Sette, *Europhys. Lett.* **75**, 70 (2006).
79. G.G. Simeoni, T. Bryk, F.A. Gorelli, M. Krisch, G. Ruocco, M. Santoro, and T. Scopigno, *Nat. Phys.* **6**, 503 (2010).
80. M. Inui, Y. Kajihara, S. Hosokawa, A. Chiba, Y. Nakajima, K. Matsuda, J.R. Stellhorn, T. Hagiya, D. Ishikawa, H. Uchiyama, S. Tsutsui, and A.Q.R. Baron, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 475101 (2021).
81. S. Hosokawa, *Z. Phys. Chem.* **235**, 99 (2020).
82. R.M. Khusnutdinoff, C. Cockrell, O.A. Dicks, A.C.S. Jensen, M.D. Le, L. Wang, M.T. Dove, A.V. Mokshin, V.V. Brazhkin, and K. Trachenko, *Phys. Rev. B* **101**, 214312 (2020).

83. T. Bryk, F. Gorelli, G. Ruocco, M. Santoro, and T. Scopigno, *Phys. Rev. E* **90**, 042301 (2014).
84. V. V. Brazhkin, Y. D. Fomin, A. G. Lyapin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, and K. Trachenko, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 145901 (2013).
85. V. V. Brazhkin, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, and K. Trachenko, *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **509**, 690 (2018).
86. Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, V. V. Brazhkin, and K. Trachenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 43LT01 (2016).
87. K. Trachenko and V. V. Brazhkin, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 016502 (2016).
88. V. V. Brazhkin, Y. D. Fomin, A. G. Lyapin, V. N. Ryzhov, and K. Trachenko, *Phys. Rev. E* **85**, 031203 (2012).
89. V. V. Brazhkin, Y. D. Fomin, A. G. Lyapin, V. N. Ryzhov, and K. Trachenko, *JETP Lett.* **95**, 164 (2012).
90. V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin, V. N. Ryzhov, K. Trachenko, Y. D. Fomin, and E. N. Tsiok, *Phys.-Uspekhi* **55**, 1061 (2012).
91. C. Cockrell, V. V. Brazhkin, and K. Trachenko, *Phys. Rep.* **941**, 1 (2021).
92. Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, and V. V. Brazhkin, *Sci. Rep.* **5**, 14234 (2015).
93. V. V. Brazhkin, O. B. Tsiok, and Y. Katayama, *JETP Lett.* **89**, 244 (2009).
94. K. Suito, M. Miyoshi, T. Sasakura, and H. Fujisava, *Elastic Properties of Obsidian, Vitreous SiO₂, and Vitreous GeO₂ Under High Pressure up to 6 GPa, High-Pressure Research: Application to Earth and Planetary Sciences*, ed. by Y. Syono and M. H. Manghnani, Terra Scientific Publishing Company (TERRAPUB), Tokyo/ American Geophysical Union, Washington, DC. (1992), p. 219.
95. G. H. Wolf, S. Wang, C. A. Herbst, D. J. Durben, W. F. Oliver, Z. C. Kang, and K. Halvorson, *Pressure Induced Collapse of the Tetrahedral Framework in Crystalline and Amorphous GeO₂, High-Pressure Research: Application to Earth and Planetary Sciences*, ed. by Y. Syono and M. H. Manghnani, Terra Scientific Publishing Company (TERRAPUB), Tokyo/ American Geophysical Union, Washington, DC. (1992), p. 50.
96. J. D. Nicholas, R. E. Youngman, S. V. Sinogeikin, J. D. Bass, and J. Kieffer, *Phys. Chem. Glasses* **44**, 249 (2003).
97. O. L. Anderson, *Equations of state of solids for geophysics and ceramic science*, Oxford University Press, Oxford, UK (1995).
98. S. M. Antao, C. J. Benmore, B. Li, L. Wang, E. Bychkov, and J. B. Parise, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 115501 (2008).
99. База данных NIST
<https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.
100. R. Feistel and W. Wagner, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **35**, 1021 (2006).
101. F. Kakinuma and S. Ohno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 619 (1987).
102. V. N. Korobenko and A. D. Rakhel, *Phys. Rev. B* **85**, 014208 (2012).
103. В. В. Бражкин, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 787 (2020).
104. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Мир, М. (1973), 425 с.

Поляроны и перенос заряда в хромите FeCr_2O_4 в рамках DFT + UН. А. Фоминых^{1*}, В. В. Стегайлов^{1**}¹Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия^{*}Московский физико-технический институт (НИУ), 141701 Долгопрудный, Россия[×]Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 апреля 2023 г.

После переработки 25 апреля 2023 г.

Принята к публикации 25 апреля 2023 г.

Предпринята попытка описать электронную структуру хромита (шпинель FeCr_2O_4) и согласованно рассмотреть вопросы орбитального упорядочения, ширины запрещенной зоны и переноса заряда в рамках теории функционала плотности с учетом сильных электронных корреляций (метод DFT + U). Показано, что в данной модели верх валентной зоны хромита представляет собой упорядоченные t_{2g} орбитали атомов железа в тетраэдрических узлах и формирование дырочных поляронов происходит именно на данных орбиталях. Рассмотрен неадиабатический барьер активации транспорта дырочных поляронов. Результаты расчетов ширины запрещенной зоны и энергии активации соотнесены с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S1234567823110083, EDN: djqbx

Описание свойств оксидов железа, в частности, магнетита Fe_3O_4 , хромита FeCr_2O_4 и их переходных состояний, с одной стороны, является одной из актуальных задач, связанных с проявлением эффектов сильных электронных корреляций в материалах [1–6]. С другой стороны, понимание свойств хромита необходимо для практических применений, например, для моделирования процесса коррозии стали [7–9]. Например, в литературе представлено описание эффектов сильных корреляций в магнетите: орбитального и магнитного упорядочения, разделения зарядов в октаэдрической подрешетке [10–14]. Использование методов, основанных на полуэмпирической модели Хаббарда [13, 15–18] (метод DFT + U [19]) или на гибридных функционалах [15, 16, 13], позволяет на количественном уровне описывать свойства данных материалов в согласии с экспериментом. Однако полного самосогласованного теоретического описания всех свойств оксидов железа на данный момент не представлено.

Описание хромита в литературе представлено также весьма слабо, причем как в экспериментальных работах, так и в первопринципных расчетах. Наблюдаются значительные отличия в результатах. Полученные экспериментально ширины запрещенной зоны в оптических измерениях составляют 2.9 эВ [20], 1.3 эВ [21], 1.5 эВ [22], 1.5 эВ [23], в то же время

во многих расчетах в рамках DFT + U щель в полной плотности электронных состояний отсутствует, а есть только в плотности состояний минорной компоненты спина [23–26], но есть работы, в которых щель составляет около 2.1 эВ [27, 28].

Электронный транспорт является также весьма важным свойством, связанным с электронной структурой, которое на данный момент почти не рассмотрено для хромита. Имеющиеся экспериментальные работы описывают электронный транспорт в магнетите в рамках модели прыжков (*hopping*) малых поляронов [29], однако и тут нет полного согласия между имеющимися экспериментами. В работах [30, 31] энергия активации составляет 0.5 эВ, а согласно результатам более современного исследования [21] энергии активации равна 0.12 эВ. В этих работах показано, что в транспорте участвуют поляроны p -типа. При этом предполагается, что транспорт происходит с участием ионов Cr^{3+} .

В данной работе в рамках подхода DFT + U мы рассматриваем совместно ширину запрещенной зоны и поляронный транспорт, что дает возможность соотнести результаты расчетов с экспериментальными данными.

Детали вычислений. Расчеты выполнялись в коде VASP [32, 33] с базисом плоских волн и приближением PAW (*projector augmented waves*) для описания электрон-ионного взаимодействия. Используется обменно-корреляционный функционал PBE (*Perdew–Burke–Ernzerhof*). Базисный набор плоских

¹) e-mail: fominykh.na@phystech.edu,
stegailov.vv@phystech.edu

волн был ограничен энергией 550 эВ. Расчетная суперячейка содержит 56 атомов (рис. 1), для суммирования по зоне Бриллюэна использовалась Г-центрированная k -сетка $3 \times 3 \times 3$. Порог сходимости для поиска самосогласованного решения составлял 10^{-6} эВ, порог оптимизации геометрии был задан по силам, равным 10^{-3} эВ/Å. Учет сильных электронных корреляций осуществлялся в соответствии с [34]. Использовались оптимальные стратегии распараллеливания расчетов [35].

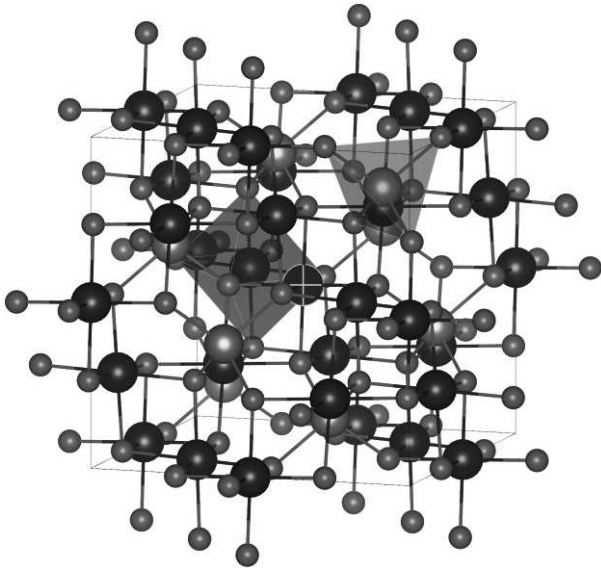


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллическая решетка хромита. Кислород показан красным, железо показано коричневым и располагается в тетраэдрических узлах решетки, хром соответственно синий и располагается в октаэдрических узлах. (Для визуализации используется VESTA [36])

Исходя из результатов, полученных для магнетита в работе [18], мы используем для железа эффективную поправку Хаббарда $U_{\text{eff}}^{\text{Fe}} = 3.8$ эВ. Экспериментальные значения постоянных решетки для магнетита $a_0^{\text{Fe}_3\text{O}_4} = 8.395$ Å и хромита $a_0^{\text{FeCr}_2\text{O}_4} = 8.378$ Å [37]. В качестве критерия для подбора согласованного значения $U_{\text{eff}}^{\text{Cr}}$ для хрома было использовано относительное соотношение постоянных решеток для магнетита и хромита $a^{\text{Fe}_3\text{O}_4}/a^{\text{FeCr}_2\text{O}_4} \approx 1$ при нулевом давлении (их отличие на 0.017 Å находится за рамками точности используемой модели). Рассматривая давление в хромите при равновесной постоянной решетки $a = 8.49$ Å соответствующей модели магнетита [18], мы получаем значение $U_{\text{eff}}^{\text{Cr}} = 2.0$ эВ (рис. 2).

Орбитальное упорядочение и оптическая щель. При ионной релаксации структуры кубической решетки хромита была получена плотность

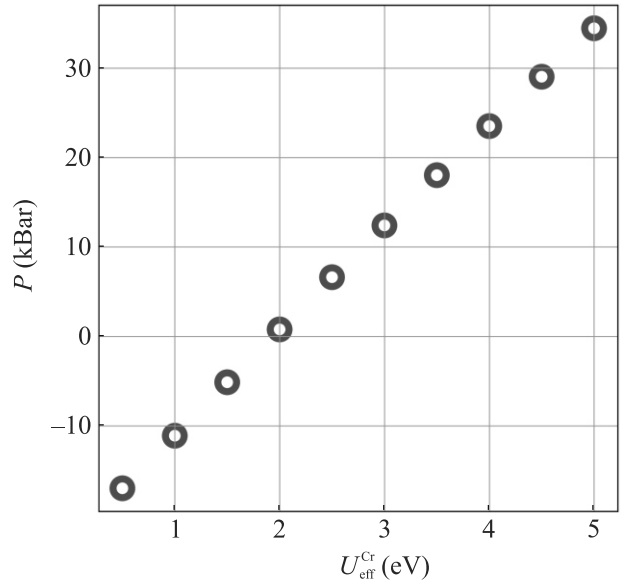


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость давления в идеальном кристалле хромита от $U_{\text{eff}}^{\text{Cr}}$ при постоянной решетке $a = 8.49$ Å и $U_{\text{eff}}^{\text{Fe}} = 3.8$ эВ

электронных состояний с щелью, равной $E_g = 1.61$ эВ. Верх валентной зоны представляет из себя упорядоченные t_{2g} орбитали атомов железа в тетраэдрических узлах (рис. 3). Такая структура показывает, что образование дырочных поляронов, связанных с хромом, весьма маловероятно, так как их электронные уровни лежат значительно ниже по энергии, в то же время перенос заряда за счет прыжков поляронов по тетраэдрическим узлам весьма вероятен.

Поляранный транспорт. В различных оксидах металлов (например, Fe_2O_3 [38], Cr_2O_3 [39], LiFePO_4 [40], TiO_2 [41], Fe_3O_4 [42], CeO_2 [43, 44]) широко представлен механизм образования поляронов – самосвязанных переносчиков заряда электронного или дырочного типа, локальное искажение решетки которых разрушает трансляционную симметрию и позволяет говорить о локализованном в решетке заряде. Это приводит к переносу заряда не по зонному механизму, а температурно активированным прыжкам поляронов между узлами решетки с некоторым барьером миграции E_a . Для описания данного механизма используются два подхода: теоретическая модель Гольдштейна–Мотта [45, 46, 47] и позволяющая непосредственную реализацию в первопринципных расчетах модель Маркуса [48, 49]. Расчеты в рамках данных подходов реализованы для различных оксидов металлов (см., например, обзоры [50, 51]).

Описание полярного транспорта, вообще говоря, требует самосогласованного описания электрон-

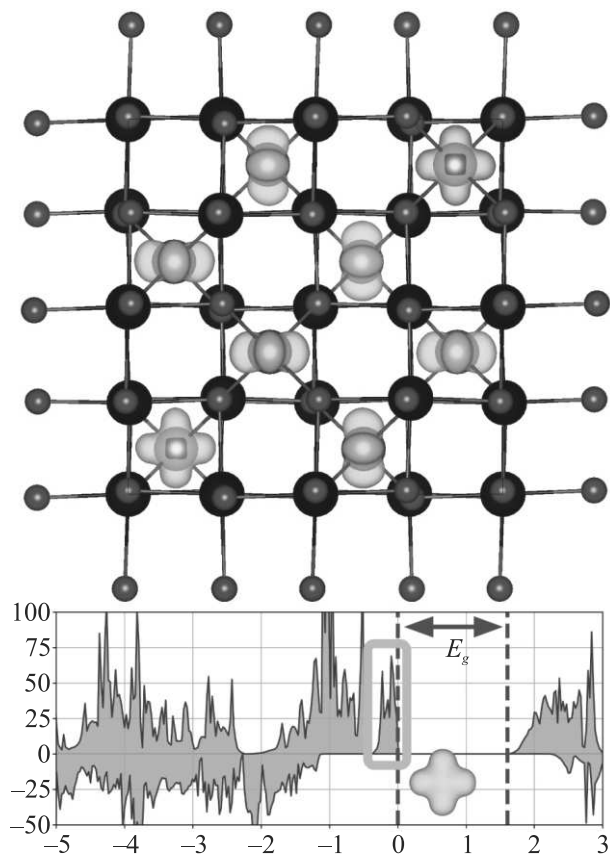


Рис. 3. (Цветной онлайн) Плотность электронных состояний (положительная компонента – спин вверх, а отрицательная – спин вниз соответственно, энергия отсчитывается от уровня Ферми) и визуализация орбитального упорядочения t_{2g} орбиталей атомов железа в идеальном хромите. Запрещенная зона $E_g = 1.61$ эВ

ной подсистемы кристалла во взаимосвязи с его фоновой подсистемой. Подобные эффекты взаимного влияния электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий, определяющие структуру локальных хаббардовских поляронов, могут быть описаны в упрощенных моделях электронной структуры [1–3]. В используемом нами статическом подходе фоновая подсистема явно не описывается: рассматриваются фиксированные конфигурации атомов вдоль некоторого пути реакции. Можно сказать, что при этом описывается основная колебательная мода, которая представляет из себя противофазное дыхательное (*breathing*) поляронное расширение решетки вокруг восстанавливаемого (*reduced*) атома металла и сжатие вокруг окисляемого атома металла [41].

В рамках теории функционала плотности для более точного описания, помимо $\text{DFT} + U$ также используют гибридные функционалы, однако обычно они склонны завышать ширину запрещенной зо-

ны и занижать энергию активации поляронного переноса, таким образом, как и в рамках $\text{DFT} + U$, для точного описания необходимо введение подгонного эмпирического параметра, связанного с долей Хартри-Фоковского обмена в гибридном функционале [44, 52].

Моделирование поляронного транспорта проводится в два основных шага: получение локализованных поляронов в интересующих состояниях и непосредственный расчет барьера миграции между этими состояниями. Для получения искажения в решетке, с которым смог бы связаться полярон, в данной работе мы сначала проводим ионную релаксацию структуры хромита с вакансией, что изменяет локальное расстояние до атомов кислорода от позиции вакансии, а затем, возвращая удаленный атом, проводим расчет с ионной релаксацией с измененным количеством электронов. Таким образом, для хромита мы получаем локализованные дырочные поляроны на t_{2g} орбиталях атомов железа (рис. 4), в то время как электронные поляроны в рассматриваемой модели не ло-

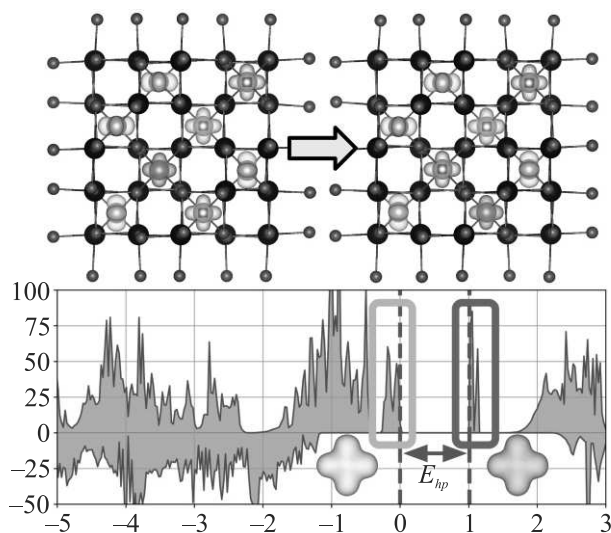


Рис. 4. (Цветной онлайн) Два различных состояния с локализованным дырочным поляроном в соседних узлах. Приведена плотность электронных состояний для случая локализованного дырочного полярона. Желтым показаны заполненные t_{2g} орбитали атомов железа, а синим – соответственно незаполненная орбиталь в позиции локализации дырочного полярона. Щель между валентной зоной и появившимся дырочным поляронном уровнем $E_{hp} = 1.01$ эВ

кализуются, что согласуется с экспериментальными данными по проводимости p -типа.

Так как перенос электрона при поляронном транспорте может происходить только при доста-

точном переносе связанного локального искажения решетки, то расположение ионов является подходящей координатой реакции. Рассматривая два локализованных положения полярона, положим $q = 0$ в начальном и $q = 1$ в конечном состояниях. Для получения переходных состояний линейно интерполируем координаты ионов в решетке: $\mathbf{R}_q = (1 - q)\mathbf{R}_{q=0} + q\mathbf{R}_{q=1}$. Далее, проводя самосогласованный электронный расчет для фиксированных промежуточных ионных конфигураций, мы получаем барьер миграции (рис. 5). Зависимость энергии от координаты реакции имеет параболический вид, что позволяет применять теорию Маркуса в данном случае. В расчетах мы видим неадиабатический режим, в котором полярон всегда остается локализованным в одном из узлов без явного переходного состояния. Зависимость энергии симметрична относительно неадиабатического переходного состояния $q = 0.5$, при котором энергии поляронов локализованных в разных узлах равны. Таким образом, в рассматриваемой модели энергетический барьер поляронного переноса составляет $E_a = 0.16$ эВ.

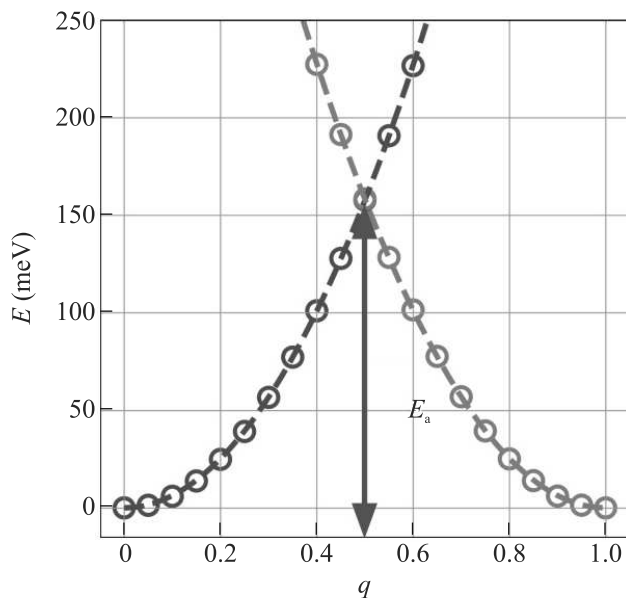


Рис. 5. (Цветной онлайн) Нормированная энергия вдоль пути миграции полярона. Синие точки соответствуют начальному состоянию зарядовой плотности при $q = 0$, оранжевые – при $q = 1$. Энергетический барьер неадиабатического поляронного переноса $E_a = 0.16$ эВ

Обсуждение результатов и выводы. Используя в качестве критерия для выбора $U_{\text{eff}}^{\text{Cr}} = 2$ эВ соотношение постоянной решетки в идеальных магнетите

и хромите, мы получаем хорошо согласованные с экспериментами ширины запрещенной зоны и энергию активации поляронного переноса, которые завышены на 15–25 % по сравнению с экспериментальными данными, что представляет собой наилучшее количественное описание по сравнению с другими опубликованными результатами первопринципных расчетов [23–28]. Наиболее вероятно, что подбором более оптимального $U_{\text{eff}}^{\text{Fe}}$ и соответственного $U_{\text{eff}}^{\text{Cr}}$ можно воспроизвести значения еще более точно.

Основываясь на полученных результатах, можно предположить, что наиболее вероятный механизм электронного транспорта в хромите – это прыжки дырочных поляронов по t_{2g} орбиталям ионов железа в тетраэдрических сайтах без прямого участия ионов хрома. Следует отметить, что согласно [30] в случае различных концентраций хрома шпинель $\text{FeFe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ имеет проводимость n -типа вплоть до концентрации $x \approx 1.2$ и p -типа после (при этом имеет место и скачок проводимости). Данный эффект, вероятно, может быть объяснен двумя режимами проводимости: 1) прыжки электронных поляронов по октаэдрическим сайтам при структурах, близких к магнетиту, 2) прыжки дырочных поляронов по тетраэдрическим сайтам при структурах, близких к хромиту. Однако все еще вполне не понятны большие различия в энергиях активации между результатами работ [21] и [30]. Исходя из согласия наших расчетов с энергией активации в 0.12 эВ в первой работе [21] и отсутствием кристаллографических данных во второй работе [30], можно предположить, что большая энергия активации в [30] является следствием использования в [30] сложного неоднородного состава образцов.

Следует упомянуть, что, как правило, существует возможность адиабатического поляронного переноса, для которого перекрытие волновой функции электрона в начальном и конечном состоянии понижает энергию миграции полярона. Возможность оценки таких механизмов приведена, например, в [41, 53], а в большинстве других работ адиабатический механизм получался непосредственно из расчетов вдоль пути реакции. При этом некоторые авторы интерпретируют свои экспериментальные результаты в рамках модели неадиабатического поляронного переноса [54, 55].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН #075-01129-23-00 от 29.12.2022 г.)

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and K. I. Kugel, *J. Phys. Condens. Matter* **22**(41), 415601 (2010).
2. Е. И. Шнейдер, И. А. Макаров, М. В. Зотова, and С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **153**(5), 820 (2018).
3. E. I. Shneyder, S. V. Nikolaev, M. V. Zotova, R. A. Kaldin, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **101**(23), 235114 (2020).
4. Е. Д. Чернов, А. В. Лукоянов, В. И. Анисимов, *ЖЭТФ* **159**(4), 644 (2021).
5. П. А. Агзамова, С. В. Стрельцов, *Физика твердого тела* **64**(1), 144 (2022).
6. I. V. Leonov, *JETP Letters* **116**, 884 (2022).
7. P. V. B. Pinho, A. Chartier, D. Menut, A. Barbier, M. O. J. Y. Hunault, Ph. Ohresser, C. Marcelot, B. Warot-Fonrose, F. Miserque, and J.-B. Moussy, *Applied Surface Science* **615**, 156354 (2023).
8. N. A. Fominykh, V. P. Nikolskiy, and V. V. Stegailov, *Comput. Mater. Sci.* **220**, 112061 (2023).
9. D. A. Kolotinskii, V. S. Nikolaev, V. V. Stegailov, and A. V. Timofeev, *Corros. Sci.* **211**, 110829 (2023).
10. H.-T. Jeng, G. Y. Guo, and D. J. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **93**(15), 156403 (2004).
11. J.-E. Lorenzo, C. Mazzoli, N. Jaouen, C. Detlefs, D. Mannix, S. Grenier, Y. Joly, and C. Marin, *Phys. Rev. Lett.* **101**(22), 226401 (2008).
12. M. S. Senn, I. Loa, J. P. Wright, and J. P. Attfield, *Phys. Rev. B* **85**(12), 125119 (2012).
13. H. Liu and C. D. Valentin, *J. Phys. Chem. C* **121**(46), 25736 (2017).
14. E. Baldini, C. A. Belvin, M. Rodriguez-Vega, I. O. Ozel, D. Legut, A. Kozłowski, A. M. Oleś, K. Parlinski, P. Piekarczyk, J. Lorenzana, G. A. Fiete, and N. Gedik, *Nature Phys.* **16**(5), 541 (2020).
15. A. D. Rowan, C. H. Patterson, and L. V. Gasparov, *Phys. Rev.* **79**(20), 205103 (2009).
16. J. Noh, O. I. Osman, S. G. Aziz, P. Winget, and J.-L. Brédas, *Chem. Mater.* **27**(17), 5856 (2015).
17. М. И. Шутикова, В. В. Стегайлов, *ЖЭТФ* **160**(2), 249 (2021).
18. M. I. Shutikova and V. V. Stegailov, *J. Phys. Condens. Matter* **34**(47), 475701 (2022).
19. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**(3), 943 (1991).
20. T. L. Sudesh, L. Wijesinghe, and D. J. Blackwood, *J. Phys. Conf. Ser.* **28**, 74 (2006).
21. A. Boudjemaa, R. Bouarab, S. Saadi, A. Bouguelia, and M. Trari, *Appl. Energy* **86**(7–8), 1080 (2009).
22. Th. Ramachandran and F. Hamed, *Mater. Res. Bull.* **95**, 104 (2017).
23. J. A. Grisales Ceréon, D. A. Landínez Téllez, and J. Roa-Rojas, *J. Electron. Mater.* **51**(2), 822 (2022).
24. D. Santos-Carballal, A. Roldan, R. Grau-Crespo, and N. H. de Leeuw, *Phys. Rev. B* **91**(19), 195106 (2015).
25. C. Benhalima, S. Amari, L. Beldi, and B. Bouhafs, *Spin* **9**, 1950014 (2019).
26. Li Sun, *J. Alloys Compd.* **875**, 160065 (2021).
27. D. A. Andersson and Ch. R. Stanek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**(37), 15550 (2013).
28. Ch. Li, P. Li, L. Li, D. Wang, X. Gao, and X. J. Gao, *RSC Adv.* **11**(35), 21851 (2021).
29. D. Ihle and B. Lorenz, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **19**(26), 5239 (1986).
30. B. Gillot, J. F. Ferriot, and A. Rousset, *J. Phys. Chem. Solids* **37**(9), 857 (1976).
31. J. Nell and B. J. Wood, *Am. Mineral.* **76**(3–4), 405 (1991).
32. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**(1), 558 (1993).
33. G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**(16), 11169 (1996).
34. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **57**(3), 1505 (1998).
35. V. Stegailov, G. Smirnov, and V. Vecher, *Concurrency and Computation: Practice and Experience* **31**(19), e5136 (2019).
36. Koichi Momma and Fujio Izumi, *J. Appl. Crystallogr.* **44**(6), 1272 (2011).
37. H. J. Levinstein, M. Robbins, and C. Capio, *Mater. Res. Bull.* **7**(1), 27 (1972).
38. N. Iordanova, M. Dupuis, and K. M. Rosso, *J. Chem. Phys.* **122**(14), 144305 (2005).
39. N. Iordanova, M. Dupuis, and K. M. Rosso, *J. Chem. Phys.* **123**(7), 074710 (2005).
40. Th. Maxisch, F. Zhou, and G. Ceder, *Phys. Rev. B* **73**(10), 104301 (2006).
41. N. A. Deskins and M. Dupuis, *Phys. Rev. B* **75**(19), 195212 (2007).
42. F. N. Skomurski, S. Kerisit, and K. M. Rosso, *Geochim. Cosmochim. Acta* **74**(15), 4234 (2010).
43. J. J. Plata, A. M. Marquez, and J. F. Sanz, *J. Phys. Chem. C* **117**(28), 14502 (2013).
44. Ch. W. M. Castleton, A. Lee, and J. Kullgren, *J. Phys. Chem. C* **123**(9), 5164 (2019).
45. D. Emin and T. Holstein, *Ann. Physics* **53**(3), 439 (1969).
46. T. Holstein, *Ann. Physics* **281**(1–2), 725 (2000).
47. I. G. Austin and N. Fr. Mott, *Adv. Phys.* **18**(71), 41 (1969).
48. R. A. Marcus and N. Sutin, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Reviews on Bioenergetics* **811**(3), 265 (1985).
49. R. A. Marcus, *Rev. Mod. Phys.* **65**(3), 599 (1993).

50. Y. Natanzon, A. Azulay, and Y. Amouyal, *Israel Journal of Chemistry* **60**(8–9), 768 (2020).
51. N.A. Deskins, P.M. Rao, and M. Dupuis, *Charge carrier management in semiconductors: modeling charge transport and recombination*, in *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, Cham (2022), p. 365.
52. T.J. Smart, T.A. Pham, Y. Ping, and T. Ogitsu, *Physical Review Materials* **3**(10), 102401 (2019).
53. Ch.S. Ahart, K.M. Rosso, and J. Blumberger, *J. Am. Chem. Soc.* **144**(10), 4623 (2022).
54. A. Yildiz, S.B. Lisesivdin, M. Kasap, and D. Mardare, *Physica B: Condensed Matter* **404**(8–11), 1423 (2009).
55. M.E. Saleta, D.P. Valdes, L. Mogni, D. Tobia, S.J.A. Figueroa, J.C. Mauricio, E. Lima Jr, G. Zampieri, and R.D. Sánchez, *J. Phys. Chem. A* **125**(17), 9371 (2021).

Electron correlation effects in paramagnetic cobalt

A. S. Belozero⁺¹⁾, V. I. Anisimov^{*×}

⁺Department of Physics, University of Hamburg, 20355 Hamburg, Germany

^{*}M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences, 620108 Yekaterinburg, Russia

[×]Ural Federal University, 620002 Yekaterinburg, Russia

Submitted 19 April 2023

Resubmitted 2 May 2023

Accepted 3 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823110095, EDN: djrpkp

Metallic cobalt is a canonical ferromagnet with an extremely high Curie temperature of 1418 K, which is significantly larger than that in iron (1043 K) and nickel (631 K). The experimental magnetic moment of ferromagnetic cobalt is also high ($1.7 \mu_B$) and exceeded only by iron ($2.2 \mu_B$) among all 3d metals.

At low temperatures, cobalt is ferromagnetic with the hexagonal close packed (hcp) lattice, which upon heating to 720 K transforms into the face-centred cubic (fcc) one. Further heating to 1418 K leads to a transition to the paramagnetic phase, which is stable up to a melting point of 1770 K.

The electronic structure of cobalt has been theoretically studied using density functional theory (DFT) within local density and generalized gradient approximations. These studies addressed electronic, structural and magnetic properties of both phases [1–6], but neglected the dynamic electron correlations, which were shown to be significant in other 3d metals [7–11]. Moreover, the DFT alone corresponds to zero temperature and cannot be applied directly to the paramagnetic state.

To obtain an accurate treatment of local many-body effects at finite temperatures, the DFT can be combined with model approaches, such as the dynamical mean-field theory (DMFT) [12]. This combination is called DFT + DMFT [13] and can be applied to both magnetically ordered and paramagnetic states at any ratio of Hubbard parameter U to bandwidth.

In this paper, we study the influence of Coulomb correlations on spectral and magnetic properties of paramagnetic fcc cobalt by the DFT + DMFT approach.

In contrast to the bcc iron, the obtained electronic self-energies exhibit a quasiparticle shape with the quasiparticle mass enhancement factor $m^*/m \sim 1.8$. These value corresponds to a moderately correlated

metal and is greater than those for chromium (1.17) [9], nickel (1.25) [10], and vanadium (1.7) [11].

The calculated uniform magnetic susceptibility follows the Curie–Weiss law with the Curie–Weiss temperature $\Theta = 1240$ K, which is 13 % less than the experimental Curie temperature of 1418 K.

To clarify the underlying cause of the Curie–Weiss behaviour, we calculate the local magnetic susceptibility $\chi_{\text{loc}} = 4\mu_B^2 \int_0^\beta \langle S_z(\tau) S_z(0) \rangle d\tau$, where S_z is the z -component of the local spin operator, β is the inverse temperature, τ is the imaginary time. The inverse of χ_{loc} also depends linearly on temperature. This finding indicates that the Curie–Weiss behaviour of uniform magnetic susceptibility is caused by formation of local magnetic moments.

To investigate the degree of magnetic moment localization, we examine the local spin-spin correlation function $\chi_{\text{spin}}(\tau) = \langle S_z(\tau) S_z(0) \rangle$ and its real-frequency counterpart $\chi_{\text{spin}}(\omega)$. The latter is obtained by Fourier transforming $\chi_{\text{spin}}(\tau)$ to imaginary frequency and then analytically continuing to real frequency ω . In the top panel of Fig. 1, we present the obtained $\chi_{\text{spin}}(\tau)$ and the real part of $\chi_{\text{spin}}(\omega)$ in comparison with those of paramagnetic chromium [9], which is a canonical itinerant antiferromagnet, and bcc iron [14] known as a system with well-defined local magnetic moments. One can see that $\chi_{\text{spin}}(\tau)$ for cobalt has an instantaneous average $\langle S_z^2 \rangle = 0.75$, which is lower than iron's value of 1.6 and close to that of chromium. However, in contrast to Cr, $\chi_{\text{spin}}(\tau)$ for cobalt saturates to a finite value at $\tau \rightarrow \beta/2$, indicating some localization of magnetic moments.

To obtain a more quantitative estimate of moments localization, we consider the real part of $\chi_{\text{spin}}(\omega)$ shown in the right panels of Fig. 1. Specifically, the half-width of the peak in $\text{Re}[\chi_{\text{spin}}(\omega)]$ at its half-height is nearly equal to the inverse lifetime of local magnetic moments [8]. The obtained results indicate that the lifetime of magnetic moments in cobalt is about 10 times

¹⁾e-mail: alexander.s.belozero^v@gmail.com

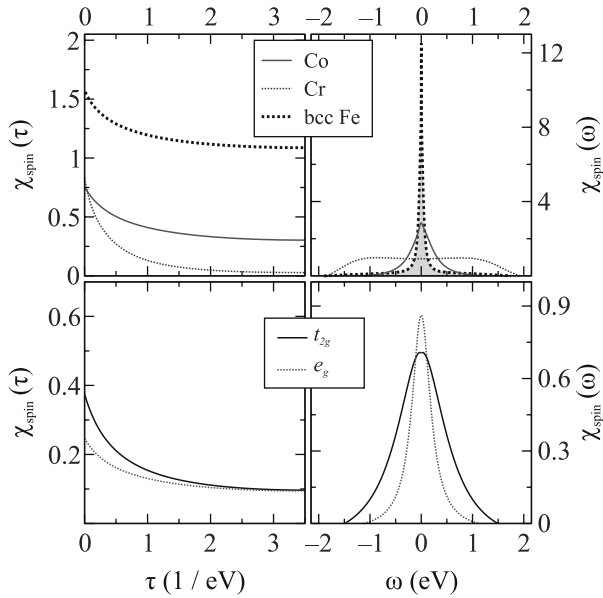


Fig. 1. (Color online) Local spin-spin correlation functions in the imaginary time τ (left panels) and real frequency ω (right panels) domains calculated by DFT + DMFT method for cobalt in comparison with those of paramagnetic chromium [9] and bcc iron [14] (top panels). Bottom panels: orbital-resolved spin-spin correlation functions for cobalt

lower than in bcc iron, but about 8 times larger than in chromium.

To identify the dominant wave-vector of magnetic response, we calculate the momentum dependence of the static magnetic susceptibility. The obtained results reveal the dominance of ferromagnetic correlations.

To summarize, we have investigated the electronic and magnetic properties of fcc cobalt by DFT + DMFT approach. The computed uniform and local magnetic susceptibilities follow the Curie–Weiss law, which has been shown to occur due to the partial formation of local magnetic moments. We found that the lifetime of these moments in cobalt is significantly less than in bcc iron, implying that the magnetism of cobalt is more itinerant. Furthermore, contrary to previous reports for bcc iron [7], we have not observed substantial orbital selectivity in cobalt. In particular, all obtained electronic self-energies in cobalt exhibit a quasiparticle shape with the quasiparticle mass enhancement factor $m^*/m \sim 1.8$, corresponding to moderately correlated metal. Analyz-

ing the momentum dependence of static magnetic susceptibility, we found a strong tendency to ferromagnetic ordering.

We thank A. A. Katanin for the valuable discussions. The DFT + DMFT calculations were supported by the Russian Science Foundation (project #19-12-00012). A. S. Belozеров was supported by the Alexander von Humboldt Foundation.

This is an excerpt of the article “Electron correlation effects in paramagnetic cobalt”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601379

1. E. G. Moroni, G. Kresse, J. Hafner, and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **56**, 15629 (1997).
2. T. C. Leung, C. T. Chan, and B. N. Harmon, Phys. Rev. B **44**, 2923 (1991).
3. M. Körling and J. Häglund, Phys. Rev. B **45**, 13293 (1992).
4. J.-H. Cho and M. Scheffler, Phys. Rev. B **53**, 10685 (1996).
5. S. F. Matar, A. Houari, and M. A. Belkhir, Phys. Rev. B **75**, 245109 (2007).
6. V. A. de la Peña O’Shea, I. de P. R. Moreira, A. Roldán, and F. Illas, J. Chem. Phys. **133**, 024701 (2010).
7. A. A. Katanin, A. I. Poteryaev, A. V. Efremov, A. O. Shorikov, S. L. Skorniyakov, M. A. Korotin, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **81**, 045117 (2010).
8. P. A. Igoshev, A. V. Efremov, A. I. Poteryaev, A. A. Katanin, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **88**, 155120 (2013).
9. A. S. Belozеров, A. A. Katanin, and V. I. Anisimov, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 385601 (2021).
10. A. Hausoel, M. Karolak, E. Şaşıoğlu, A. Lichtenstein, K. Held, A. Katanin, A. Toschi, and G. Sangiovanni, Nat. Commun. **8**, 16062 (2017).
11. A. S. Belozеров, A. A. Katanin, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **107**, 035116 (2023).
12. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
13. V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 7359 (1997).
14. A. S. Belozеров, A. A. Katanin, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **96**, 075108 (2017).

Robust and fast quantum state transfer on superconducting circuits

X.-Q. Liu⁺, J. Liu^{+*1)}, Z.-Y. Xue^{+*1)}

⁺Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials,
and School of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, 510006 Guangzhou, China

^{*}Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, and Frontier Research Institute for Physics,
South China Normal University, 510006 Guangzhou, China

Submitted 7 April 2023
Resubmitted 20 April 2023
Accepted 28 April 2023

DOI: 10.31857/S1234567823110101, EDN: djrvhp

The Quantum spin chain for QST was first proposed by Bose [1]. In order to achieve perfect transmission with long distance, many kinds of programs have been presented [2–10]. And it is shown that the precise control of coupling strength is a good solution [2–4], but it is challengeable for experiment operations. Therefore, to make the experimental operation as simple as possible, the idea of reducing the ratio of the coupling intensity between the two ends and the chain is put forward [11, 12], where the whole system is simplified into a two-state or three-state system, and then using the characteristics of the energy spectrum, the state is resonately transferred [11, 13]. It is worth noting that in this scheme, high efficiency is accompanied by a small ratio, if high fidelity is obtained, then the transmission time closely associated with the coupling strength will be very long, at the same time, the influence of external factors on the system will enlarge. Therefore, the question of how to shorten the time of state transmission and obtain higher fidelity is our objective.

In this paper, we find another method to achieve state transmission with shorter time and higher fidelity. The idea is to enlarge the proportion of the coupling strength between the two ends and the chain and add alternating on-site potential, which can improve transmission efficiency.

The protocol of description is shown in Fig. 1a, where the coupling strength inside the spin chain is J , and the two relative ends of the chain are connected by the coupling strength g . Thence, the Hamiltonian of the system can be described by

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{j=1}^N \lambda_j S_j^z + \sum_{j=2}^{N-2} J(S_j^+ S_{j+1}^- + \text{H.c.}) + g(S_1^+ S_2^- + S_{N-1}^+ S_N^- + \text{H.c.}), \quad (1)$$

where $\lambda_j = (-1)^j \lambda$ is the on-site potential, and N is the total number of spin qubits. With Jordan–Wigner transformation [14], i.e., $c_j = \exp\left[i\pi(\sum_{l=0}^{j-1} S_l^+ S_l^-)\right] S_j^-$, the Hamiltonian is transformed to

$$\mathcal{H}_1^T = \sum_{j=1}^N \lambda_j c_j^\dagger c_j + \sum_{j=2}^{N-2} J(c_j^\dagger c_{j+1} + \text{H.c.}) + g(c_1^\dagger c_2 + c_{N-1}^\dagger c_N + \text{H.c.}). \quad (2)$$

With the help of “operators” commutation relations, $[\mathcal{H}_1^T, \sum_{j=1}^N n_j] = 0$, where $n_j = c_j^\dagger c_j$ is the “particle” number operator, the Hamiltonian of the Eq. (1) is transformed to another Hilbert space consisting of eigenvectors of particle number operators.

In our proposal, there are three parameters $\{J, g, \lambda\}$, which together determine the performance of QST. Our goal is to realize the QST with a longer chain and higher fidelity by searching for appropriate parameters. We display the QST of 9 spin qubits with our scheme. Here and after, setting $J = 1$, we plot the effect of parameters $\{g, \lambda\}$ for QST, as shown in Fig. 1b, and the better results without decoherence and decoherence rate Γ satisfying $\Gamma/J = 10^{-3}$ are displayed. We also extend the length of the chain to 11, and the better results that decoherence rate Γ equals to 0 and satisfies $\Gamma/J = 10^{-3}$ are displayed.

In previous works [11, 13], high-fidelity transmission can be achievable under the restriction condition $J \gg g$, and the long evolution time is accompanied. Besides, if you consider the system’s decoherence, the fidelity of the whole operation will be discounted. In our proposal, adding on-site potential to the qubits in the chain, even though g takes a slightly larger value, high-efficiency QST can be achievable within shorter evolution time. More importantly, the scheme is relatively easy to implement in the experiment and details are as follows.

The spin chain is simulated on superconducting circuits, where adjacent transmons are coupled by a large

¹⁾e-mail: liuj.phys@foxmail.com; zyxue83@163.com

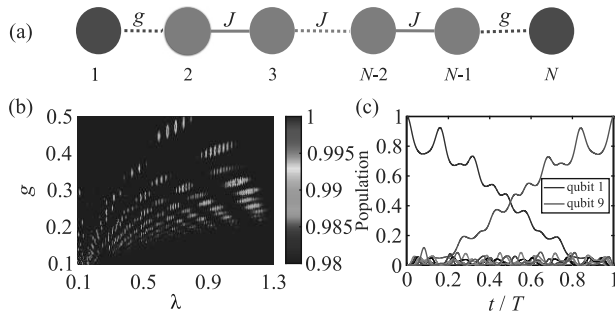


Fig. 1. (Color online) (a) – An illustration of the scheme, a spin chain links the sender (site 1) and the receiver (site N) with coupling strength g , and the coupling strength of the interchain is J , which is set to be 1 in the numerical calculation. (b) – The numerical simulation of large-scale search results in the case $N = 9$. The diagram represents the fidelity distribution on the g - λ plane. (c) – The specific process of state transfer as an example of 9 spin qubits. The system prepares the initial state. After a period of evolution time τ , the state is retrieved from the extreme of the chain with confidence

capacitance. The Hamiltonian of the coupled system can be written as

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{l=1}^N \frac{\omega_l}{2} \sigma_l^z + \sum_{l=1}^{N-1} \Omega_l (\sigma_l^\dagger \sigma_{l+1} + \text{H.c.}), \quad (3)$$

where ω_l and $\sigma_l^\dagger$ denote the frequency and the creation operator for the l th transmon, respectively, and Ω_l is coupling strength between l th and $(l+1)$ th transmons. In accordance with the scheme, tunable coupling strength is necessary and can be achieved by our parametric modulation on the qubits [15]. The representation transformation and rotating-wave approximation is conducted, and then the effective Hamiltonian can be obtained, i.e.

$$\mathcal{H}_2^{\text{eff}} = \sum_{l=1}^N \frac{m_l}{2} \sigma_l^z + \sum_{l=1}^{N-1} \Omega_l^{\text{eff}} (\sigma_l^\dagger \sigma_{l+1} + \text{H.c.}), \quad (4)$$

where m_l represents frequency distance between neighboring transmons and external driving, and is determined according to the Hamiltonian to be simulated.

In the case of length for $N = 9$, the coupling strengths of the two ends and the middle are the same separately, that is $\Omega_1 = \Omega_8$, $\Omega_2 = \Omega_3 = \dots = \Omega_7$, and $\Omega_1 = 0.31\Omega_2$. And for $N = 11$, the coupling strengths among transmons are identical and remarked as Ω_1 . Here, we take the specific values for Ω_2 with respect to 9 transmons and Ω_1 about 11 transmons. With the

decoherence rate $\Gamma = 2\pi \times 5$ kHz, numerical simulation in the case $N = 9$ is with fidelity of 99.36%, and in the case $N = 11$ is 98.62%, which shows our scheme is robust against decoherence.

In summary, we propose a scheme to implement high-fidelity QST in a spin chain. Our proposal is achieved by modulating coupling strength and adding on-site potential, which effectively reduces the evolution time and has strong robustness against decoherence. In other words, the benefit of our scheme is robust against the decoherence due to shorter time brought by coupling strength. That long distance and high fidelity quantum state transmission will shed light on the realization of a quantum computer in the future.

This is an excerpt of the article “Robust and fast quantum state transfer on superconducting circuits”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601057

1. S. Bose, Phys. Rev. Lett. **91**, 207901 (2003).
2. M. Christandl, N. Datta, A. Ekert, and A. J. Landahl, Phys. Rev. Lett. **92**, 187902 (2004).
3. C. Albanese, M. Christandl, N. Datta, and A. Ekert, Phys. Rev. Lett. **93**, 230502 (2004).
4. M. Christandl, N. Datta, T. C. Dorlas, A. Ekert, A. Kay, and A. J. Landahl, Phys. Rev. A **71**, 032312 (2005).
5. M.-H. Yung and S. Bose, Phys. Rev. A **71**, 032310 (2005).
6. D. L. Feder, Phys. Rev. Lett. **97**, 180502 (2006).
7. D. Burgarth and S. Bose, Phys. Rev. A **71**, 052315 (2005).
8. V. Giovannetti and D. Burgarth, Phys. Rev. Lett. **96**, 030501 (2006).
9. D. Burgarth, V. Giovannetti, and S. Bose, Phys. Rev. A **75**, 062327 (2007).
10. A. Zwick, G. A. Álvarez, J. Stolze, and O. Sendra, Phys. Rev. A **85**, 012318 (2012).
11. A. Wójcik, T. Łuczak, P. Kurzyński, A. Grudka, T. Gdala, and M. Bednarska, Phys. Rev. A **72**, 034303 (2005).
12. L. Banchi, T. J. G. Apollaro, A. Cuccoli, R. Vaia, and P. Verrucchi, Phys. Rev. A **82**, 052321 (2010).
13. N. Y. Yao, L. Jiang, A. V. Gorshkov, Z.-X. Gong, A. Zhai, L.-M. Duan, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **106**, 040505 (2011).
14. L. Elliott, S. Theodore, and D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
15. J. D. Strand, M. Ware, F. Beaudoin, T. A. Ohki, B. R. Johnson, A. Blais, and B. L. T. Plourde, Phys. Rev. B **87**, 220505 (2013).

Реализация протокола квантовой памяти на основе восстановления сигнала подавленного эха в ортогональной геометрии на телекоммуникационной длине волны

М. М. Миннегалиев¹⁾, К. И. Герасимов, С. А. Моисеев

Казанский квантовый центр, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева,
420111 Казань, Россия

Поступила в редакцию 11 апреля 2022 г.

После переработки 26 апреля 2023 г.

Принята к публикации 29 апреля 2023 г.

В данной работе экспериментально реализован протокол оптической квантовой памяти на основе восстановления сигнала подавленного эха (ROSE) на телекоммуникационной длине волны для сигнальных световых полей с малым числом фотонов. Для этого была инициализирована долгоживущая (> 1 с) линия поглощения и выбрана ортогональная геометрия распространения сигнального и рефразирующего полей. Достигнута эффективность восстановления для ортогональных компонент поляризации сигнального импульса 17 ± 1 % при времени хранения 60 мкс. Входной импульс содержал в среднем ~ 38 фотонов, а восстановленный эхо-сигнал ~ 6 фотонов при отношении сигнал-шум = 1.3.

DOI: 10.31857/S1234567823110113, EDN: djxudp

Оптическая квантовая память (ОКП) предназначена для хранения квантовых состояний света с последующим извлечением этих состояний по запросу в произвольный момент времени. При этом разработка эффективной многокубитовой ОКП на телекоммуникационной длине волны ($\lambda \sim 1.5$ мкм) является одной из ключевых задач в оптических квантовых технологиях [1], в значительной степени благодаря большому интересу к созданию на ее основе квантового повторителя для оптических квантовых коммуникаций на дальние расстояния [2], а также рассматривается важным модулем для создания сети квантового интернета и универсального квантового компьютера [3]. За последние два десятилетия были предложены разные протоколы эффективной записи и считывания фотонных кубитов из ячейки ОКП [4, 5]. Схема ОКП, основанная на использовании высокоэффективного обращенного фотонного эха в оптически плотной среде [6], нашла активное применение в разработке ряда протоколов ее реализации в кристаллах, активированных редкоземельными ионами [7]. Один из таких протоколов основан на восстановлении сигнала подавленного эха (*revival of silenced echo* – ROSE протокол) [8], разработка которого является предметом настоящего исследования.

Протокол ROSE близок к классической схеме двухимпульсного фотонного эха, где к сигнальному и

рефразирующему импульсу добавляется второй рефразирующий импульс, восстанавливающий сигнал первичного эха, который излучается уже в неинвертированной системе [9]. Максимум ROSE-сигнала достигается, когда рефразирующие световые импульсы имеют импульсную площадь π , что совпадает с известной в ЯМР (ядерный магнитный резонанс) последовательностью Карр–Парсела [10]. Вместе с тем, в отличие от сигналов эха в последовательности Карр–Парсела, излучение первичного фотонного эха полностью подавляется в ROSE-протоколе, а в ROSE-сигнале излучается практически вся запасенная в атомах энергия при точной реализации протокола. Относительная простота экспериментальной реализации и большое время жизни квантовой когерентности ROSE-протокола привлекает внимание к его разработке в различных экспериментальных условиях. Подавление первичного эха обеспечивается разными способами, например, путем управления условиями фазового синхронизма за счет выбора направления распространения сигнального и рефразирующего лазерных полей, как было показано в работах [8, 11, 12], или с помощью дополнительного контроля рефазировки атомной когерентности [13–15]. Недавно ROSE-протокол был реализован в резонаторе в режиме согласования связи с адресной записью и считыванием сигнальных импульсов [16]. Также отметим экспериментальные разработки ROSE-протокола в интегральных структурах [17, 18].

¹⁾e-mail: mansur@kazanqc.org

В экспериментальных работах [8, 11, 12, 16–18] были использованы оптические переходы некрамеровских редкоземельных ионов тулия ($\lambda \sim 793$ нм) и европия ($\lambda \sim 580$ нм), применение которых для работы на телекоммуникационной длине волны представляется крайне затруднительным. Для практических применений большой интерес вызывает оптический переход ионов эрбия $^4I_{15/2} - ^4I_{13/2}$, длина волны перехода которого в кристалле Y_2SiO_5 ($\lambda \sim 1.5$ мкм) лежит в окне прозрачности стандартного телекоммуникационного оптоволокна. При использовании коллинеарной геометрии распространения световых импульсов в этом кристалле ROSE протокол был реализован с наилучшей эффективностью 40 % [19, 20]. В этих работах в качестве рефазирующих импульсов лучше всего зарекомендовали себя импульсы с амплитудной и частотной модуляцией [16, 21]. Однако, даже такие импульсы не обеспечили достаточно высокой степени инверсии резонансных переходов в условиях реального эксперимента с ансамблем двухуровневых атомов, что приводило к появлению крайне нежелательного спонтанного излучения во время излучения ROSE-сигнала. Одним из способов уменьшения квантовых шумов, вызванных люминесценцией, является модификация линии поглощения неоднородно уширенного перехода, приводящая к появлению остаточной населенности возбужденных атомов лишь в спектральном диапазоне сигнального импульса [16]. Для практического использования ROSE-протокола необходимо, чтобы модифицированная линия поглощения обладала достаточно большим временем жизни. Отметим, что создание долгоживущих спектральных провалов для некрамеровских ионов (таких, как Eu^{3+} , Pr^{3+} , ...) электронный магнитный момент которых равен 0, не является сложной задачей, поскольку сверхтонкие подуровни обладают большими временами жизни T_1 , например, $T_1 = 23$ дня для ионов европия в кристалле Y_2SiO_5 [22].

Крамеровские ионы (такие, как Er^{3+} , Nd^{3+} ...) можно характеризовать эффективным электронным спином $S = 1/2$. Для этих ионов типична быстрая релаксация электронного спина, которая значительно сокращает время жизни сверхтонких состояний иона. Вместе с тем, в работах [23, 24] было показано, что переходы между электронно-ядерными подуровнями основного состояния $^{167}Er^{3+}$ в кристалле Y_2SiO_5 могут обладать большими временами жизни и спиновой когерентности (десятки и единицы секунд) при дополнительном ослаблении процессов электронной спиновой релаксации. Это возможно при помещении кристалла в большие магнитные поля ($H > 3$ Тл)

и низкие температуры ($T < 1.5$ К), при которых электронный спин основного состояния практически полностью “вымораживается”, так что относительно быстрая спиновая релаксация начинает слабо влиять на релаксацию ядерных спинов [23]. Оптические переходы ионов $^{167}Er^{3+}$ в кристалле Y_2SiO_5 на длине волны $\lambda \sim 1538.3$ нм (второй тип примесного центра) происходят между 8-ю нижними по энергии сверхтонкими подуровнями основного крамеровского дублета и 8-ю сверхтонкими подуровнями оптически возбужденного дублета. При этом спектр поглощения состоит из трех групп линий, соответствующих оптическим переходам с изменением проекции ядерного спина $\Delta m_I = m_I(g) - m_I(e) = -1, 0, +1$. Сверхтонкая структура в наблюдаемом спектре поглощения достаточно хорошо оптически разрешена, что позволяет поэтапно переводить весь ансамбль ионов в одно долгоживущее сверхтонкое состояние и создавать оптической накачкой высокую ядерную спиновую поляризацию [24]. Использование такого начального состояния в ансамбле ионов $^{167}Er^{3+}$ открывает большие возможности в улучшении базовых параметров ROSE-протокола, что является целью настоящего исследования.

В данной работе мы экспериментально реализовали ROSE протокол в кристалле $^{167}Er^{3+}: Y_2SiO_5$ с использованием ортогональной геометрии распространения сигнального и рефазирующих полей с подготовкой начального спектра поглощения на оптическом переходе $^4I_{15/2}(0) - ^4I_{13/2}(0)$ ионов эрбия с целью уменьшения уровня квантовых шумов в изучаемом протоколе ОКП. Ортогональная геометрия по сравнению с коллинеарной геометрией распространения сигнального и рефазирующих импульсов обладает следующими преимуществами. Во-первых, рефазирующие импульсы испытывают меньшие искажения из-за эффектов распространения в оптически плотной среде, так как сигнальный луч может проходить рядом с торцом кристалла. Во-вторых, такая геометрия обеспечивает лучшую пространственную изоляцию от рассеянных фотонов в рефазирующем пучке. В-третьих, ортогональная геометрия наиболее удобна для дальнейшего использования резонатора для сигнального пучка.

Упрощенная схема квантовых переходов ионов $^{167}Er^{3+}$ приведена на рис. 1а. Принципиальная схема экспериментальной установки и временные последовательности используемого лазерного излучения и импульсов показаны на рис. 1б, с и 2, соответственно. Источниками лазерного излучения в экспериментальной установке служили два перестраиваемых одночастотных диодных лазера, настроен-

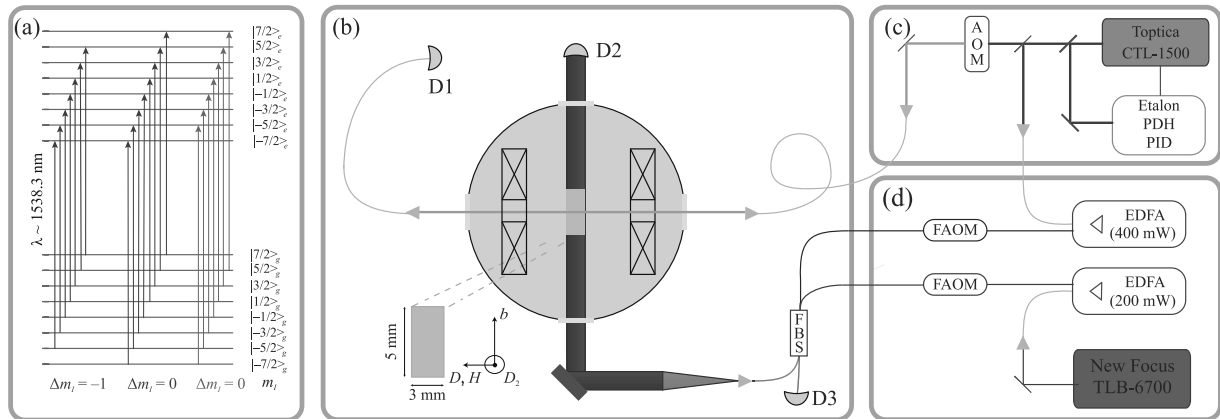


Рис. 1. (Цветной онлайн) Упрощенная схема экспериментальной установки. (а) – Схема квантовых переходов между энергетическими уровнями $^{167}\text{Er}^{3+}$. (б) – Кристалл $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$, находящийся в криостате при температуре 1.3 К и внешнем магнитном поле $H = 3.39$ Тл. Желтыми треугольниками показаны ввод/вывод излучения из оптического волокна, D-детекторы, FBS-волоконный светоделитель 50:50; AOM-акустооптический модулятор света. (с) – Модуль подготовки сигнального и зондирующего поля, часть излучения отводится в модуль *d* для модификации линии поглощения и создания рефазировующих импульсов. (d) – Модуль подготовки рефазировующих импульсов (с помощью лазера Toptica CTL-1500) и лазерного излучения для перераспределения ионов эрбия в основном состоянии (с помощью лазера New Focus TBL-6700). EDFA-эрбиевый волоконный оптический усилитель, FAOM-волоконный акустооптический модулятор света

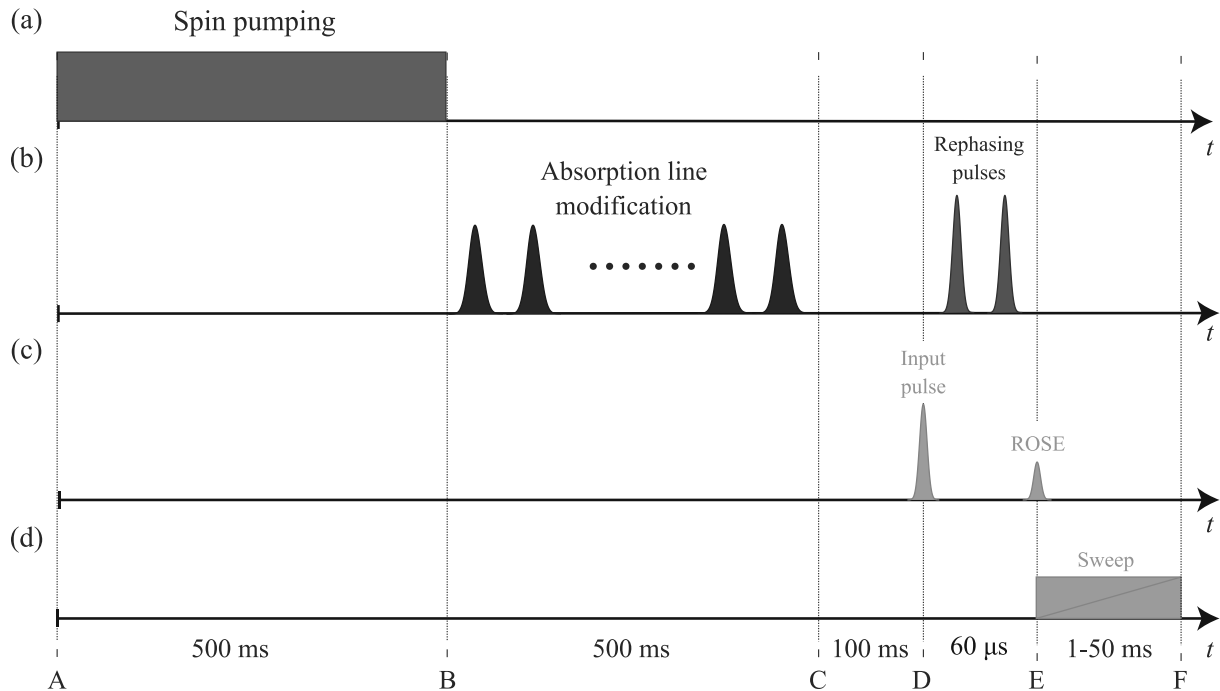


Рис. 2. (Цветной онлайн) Временная последовательность световых импульсов. (а) – Длинный импульс излучения (spin pumping), обеспечивающий перераспределение населенности между сверхтонкими подуровнями основного состояния ионов эрбия (A-B). (б) – Последовательность импульсов для инициализации начального спектра поглощения (B-C) и генерации рефазировующих импульсов (D-E). (с) – Момент запуска сигнального импульса (D) и время излучения ROSE-сигнала (E). (d) – Пробное излучение (E-F), зондирующее спектр поглощения в рабочем спектральном диапазоне

ные на длину волны $\lambda = 1538.35$ нм используемого оптического перехода ионов эрбия (второй тип примесного центра). Перераспределение населенно-

сти между сверхтонкими подуровнями основного состояния ионов эрбия осуществлялось с помощью диодного лазера (New Focus TLB-6700, рис. 1с). Излуче-

ние этого лазера модулировалось по частоте и проходило через волоконный эрбиевый усилитель (Keopsys CEFA-C-PB-LP-SM), где усиливалось до мощности ~ 80 мВт в непрерывном режиме перед попаданием излучения в криостат с кристаллом $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$. Длина волны излучения лазера была настроена на оптические переходы эрбия с переворотом ядерного спина $\Delta m_I = -1$ (показаны на рис. 1а красным цветом и на рис. 3 горизонтальной красной скобкой). Время перераспределения населенности между сверхтонкими подуровнями задавалось равным 500 мс (рис. 2а). Для формирования последовательностей световых импульсов, приведенных на рис. 2b–d, был использован другой задающий лазер (Toptica CTL-1500), частота которого с помощью сервоконтроллера (Vescent Photonics D2-125) была стабилизирована оптическим эталоном, обладающим большой резкостью ($F > 1000$) и высокой термостабильностью (< 5 МГц/°C) резонансной частоты. Последовательности сигнальных и зондирующих импульсов (рис. 2с и d соответственно) формировались из излучения задающего лазера с помощью акустооптического модулятора (АОМ) (см. рис. 1с). Часть лазерного излучения дополнительно усиливалась с помощью волоконного эрбиевого усилителя (до 180 мВт перед криостатом). Усиленное излучение проходило через волоконный АОМ (рис. 1d), который формировал последовательности импульсов, используемых для модификации линии поглощения и для создания рефазированных импульсов (см. рис. 2b). Последовательности импульсов, приведенные на рис. 2, повторялись с частотой 0.5 Гц.

Кристалл $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$) в форме прямоугольного параллелепипеда, имеющего размеры $3 \times 3 \times 5$ мм³, с ребрами параллельными осям $D_1 \times D_2 \times b$ (показано во вставке рис. 1b), охлаждался до температуры 1.3 К в криостате замкнутого цикла со сверхпроводящим магнитом. Магнитное поле было направлено вдоль оси D_1 кристалла и имело величину $H = 3.39$ Тл. Сигнальный световой импульс (E_s) распространялся параллельно оси D_1 кристалла ($\mathbf{k}_{E_s} \parallel \mathbf{D}_1 \parallel \mathbf{H}$, бирюзовая линия на рис. 1b) и был поляризован либо вдоль оси D_2 ($\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$), либо вдоль оси b кристалла ($\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{b}$). Световые импульсы, последовательности которых приведены на рис. 2а и b, распространялись вдоль оси $\mathbf{b}$ кристалла с длиной 5 мм в этом направлении. Поляризация световых импульсов была ориентирована параллельно оси D_1 кристалла.

Для измерения входного сигнального импульса и излучаемого ROSE-сигнала был использован фотодетектор (обозначен D1 на рис. 1а) на основе лавинного фотодиода (Thorlabs APD110C/M), сигнал

с которого поступал на осциллограф (Tektronix DPO 7104C). Лавинный фотодиод заменялся на сверхпроводниковый детектор одиночных фотонов (Scontel SSPD) в экспериментах с сигнальными импульсами, содержащими малое число фотонов. В этом случае в детектирующий канал был также добавлен волоконный фильтр (SKEO SK-CF55M), который не пропускал излучение с длинами волн, соответствующими люминесценции с оптического возбужденного уровня $^4I_{13/2}(0)$ на два возбужденных уровня основного мультиплета $^4I_{15/2}(n = 1; 2)$. Длины волн люминесценции на другие уровни эрбия $^4I_{15/2}(n > 2)$ находились вне рабочего спектрального диапазона детектора. Таким образом, на фотодетектор D1 попадало излучение с частотами, соответствующими резонансной линии люминесценции, совпадающей с частотным диапазоном ОКП.

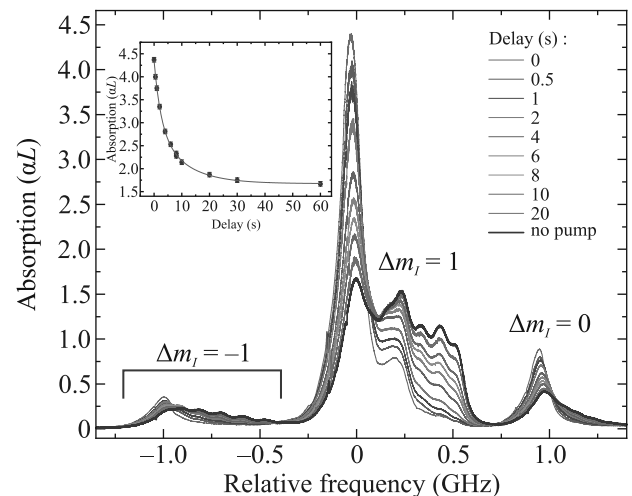


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектр поглощения оптического перехода $^4I_{15/2}(0) - ^4I_{13/2}(0)$ ионов эрбия (второй тип примесного центра, $\lambda \sim 1538.35$ нм, $H = 3.39$ Тл, $\mathbf{k}_{E_s} \parallel \mathbf{D}_1 \parallel \mathbf{H}$, $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$) черная сплошная кривая. Перераспределение населенности сверхтонких подуровней основного состояния преимущественно на состояние $m_I = |-7/2\rangle$ в зависимости от времени задержки В-Е (в секундах) между перераспределяющим импульсом (рис. 2а) и зондирующим излучением (рис. 2d). Данная зависимость приведена в виде поведения спектра поглощения на данном оптическом переходе при разных временах задержки зондирующего излучения, а также в виде зависимости величины поглощения наиболее интенсивной линии вблизи 0 ГГц от задержки В-Е (вставка в левом верхнем углу). Красной скобкой $\Delta m_I = -1$ показан спектральный диапазон сканирования перераспределяющего лазера

На рисунке 3 представлены экспериментальные данные по кинетике перераспределения населенно-

сти сверхтонких подуровней основного состояния ионов $^{167}\text{Er}^{3+}$, преимущественно на состояние $m_I = -7/2$ в зависимости от времени задержки В-Е, задаваемого в секундах на рис. 2 между перераспределяющим импульсом (рис. 2а) и зондирующим (sweep) излучением (рис. 2d). Спад поглощения (населенности состояния), наблюдаемый для наиболее интенсивной линии, расположенной вблизи 0 ГГц, в зависимости от задержки подаваемого зондирующего излучения приведен на вставке рис. 3. Полученные экспериментальные данные по кинетике спада поглощения хорошо описываются суммой двух экспонент $\alpha L(\tau_{BE}) = \alpha L_{np} + A_1 e^{-\frac{\tau_{BE}}{T_{\text{middle}}}} + A_2 e^{-\frac{\tau_{BE}}{T_{\text{slow}}}}$, где $T_{\text{middle}} \cong 2.5 \pm 0.3$ с, $T_{\text{slow}} \cong 10.3 \pm 2$ с, $A_1 = 1.42$, $A_2 = 1.25$, $\alpha L_{np} = 1.67$. Результат аппроксимации представлен на графике сплошной кривой красного цвета. Стоит отметить, что измеренное время T_{slow} совпадает с хорошей точностью со значением, полученным в работе [25] в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ для первого примесного центра при $T = 1.6$ К в отсутствии внешнего магнитного поля.

Далее был подготовлен начальный спектр поглощения на оптическом переходе с правилом отбора $\Delta m_I = 0$ между сверхтонкими подуровнями основного и возбужденного состояниями $\Delta m_I = |-7/2\rangle$. Для этого использовалась последовательность из 2-х прожигающих лазерных импульсов, представленная на рис. 2b (В-С). Эти импульсы имели амплитудную и частотную модуляцию [16, 21], электрическое поле $\varepsilon_p(t)$ и несущая частота $\omega_p(t)$ импульсов были следующего вида:

$$\varepsilon_p(t) = \varepsilon_0 \text{sech}(\beta(t - t_p)), \quad (1)$$

$$\omega_p(t) = \omega_{0,p} + \mu\beta \tanh(\beta(t - t_p)), \quad (2)$$

где $p = 1, 2$, параметры β и μ определяют длительность импульсов (β^{-1}) и его спектральную ширину ($2\mu\beta$). Такие импульсы позволяют эффективно инвертировать ансамбль атомов, резонансные частоты которых лежат в спектральном интервале $2\mu\beta$. При создании таких импульсов была учтена нелинейная передаточная функция АОМа. Для чего на вход АОМа подавалась скомпенсированная форма импульса, чтобы на его выходе интенсивность имела временную зависимость $I_p(t) \sim \varepsilon_p^2(t) = \varepsilon_0^2 \text{sech}^2(\beta(t - t_p))$. Центральная частота прожигающих импульсов ($\omega_{0,p}$) задавалась левее ($p = 1$) и правее ($p = 2$) рабочего диапазона ОКП согласно:

$$\omega_{0,p} = \omega_0 + (-1)^p \frac{\Delta}{2}, \quad (3)$$

где ω_0 – центральная частота сигнального импульса, $\Delta = 2$ МГц – расстояние между центрами спектраль-

ных провалов, превышающим спектральную ширину импульса ($\delta\omega = 2\mu\beta = 1$ МГц, $\beta = 2\pi \times 50$ кГц и $\mu = 10$), которая соответствует ширине приготавливаемых спектральных провалов. Воздействие последовательностью из 2-х импульсов занимало время 100 мкс и повторялась 5000 раз. Сразу после приготовления спектра поглощения наибольшая часть ионов Er находится в оптически возбужденном состоянии. Последующая люминесценция с этого состояния приводит к появлению квантового шума при одновременном излучении ROSE-сигнала. Для подавления уровня люминесценции вводится дополнительное время ожидания $\tau_w \approx 10 \cdot T_{\text{lopt}}$ (где $T_{\text{lopt}} \sim 10$ мс – время жизни возбужденного состояния $^4I_{13/2}(0)$), в течение которого подавляющее число ионов успевают перейти из возбужденного в основное состояние. В данном случае время ожидания τ_w составило 100 мс.

Спектр полученной структуры представлен на рис. 4а (черная кривая). Наблюдаемому пику поглощения вблизи центра линии отвечает оптическая плотность $\alpha L_{\text{peak}} = 1.65$, спектральная ширина на половине высоты пика поглощения составила 250 кГц, что совпадает со спектральной шириной входного сигнального импульса. В местах просветления по бокам от центрального пика поглощения величина поглощения уменьшалась до остаточного уровня d_0 , определяющего оптическую плотность $\alpha_L = 0.65$, который заметно зависит от дополнительного времени ожидания τ_w . График восстановления d_0 от времени τ_w представлен на рис. 4б. Красной сплошной линией приведен результат аппроксимации поведения d_0 в виде суммы двух экспонент с характерными временами $T_{\text{lopt}} = 10$ мс и $T_1 = 600$ мс. Эти времена (T_{lopt}, T_1) находятся в согласии с временами релаксации, приведенными в работе [25] для первого примесного центра в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ при температуре $T = 1.6$ К в отсутствии внешнего магнитного поля. Отношение поглощения на центральной частоте сигнального импульса (αL_{peak}) к уровню остаточного поглощения (d_0) по краям пика составило $\alpha L_{\text{peak}}/d_0 = 2.5$, что позволило уменьшить уровень квантового шума, вызванного люминесценцией ионов с оставшихся частично населенными возбужденными состояниями, оптические частоты переходов которых находятся вне спектрального диапазона сигнального импульса. Вместе с тем уменьшение уровня остаточного поглощения является важной задачей, особенно при дальнейшем увеличении эффективности восстановления входного сигнала при помещении ячейки ОКП в оптический резонатор в режиме согласования связи. Для этого можно приме-

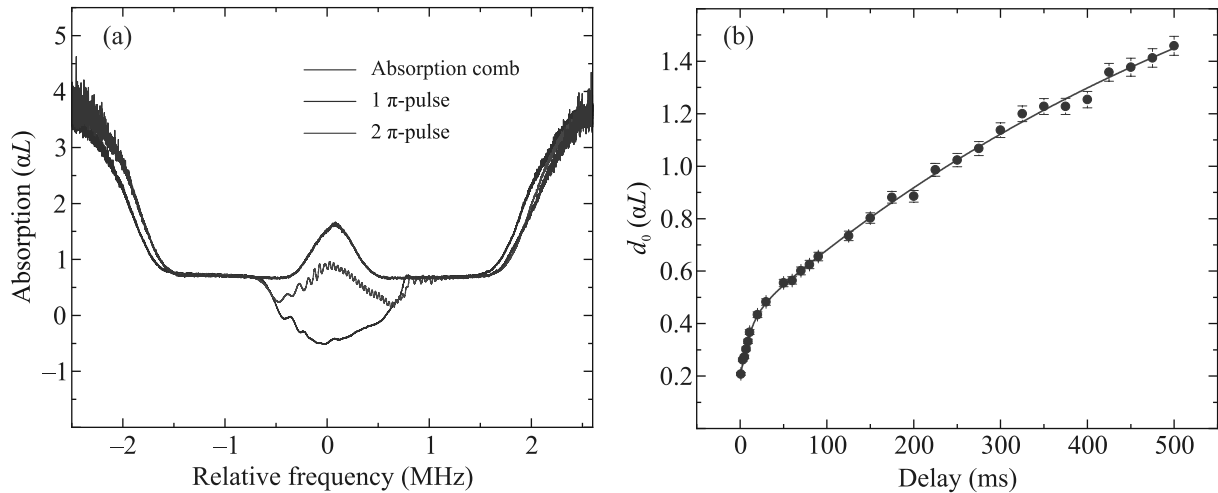


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Линия поглощения, подготовленная с использованием последовательностей лазерных импульсов, приведенных на рис. 2а, b и d без рефазировочных импульсов (черная кривая), с одним (синяя кривая) и двумя (красная кривая) рефазировочными импульсами в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$, $T = 1.3\text{ K}$). (b) – Восстановление остаточного поглощения (в частотном диапазоне 1–2 МГц рис. 4а) в зависимости от дополнительного времени ожидания τ_w

нить последовательность световых импульсов, предложенную в работе [24]. Она является более сложной с точки зрения экспериментальной реализации, при этом обеспечивает довольно низкий уровень остаточного поглощения порядка $d_0 = 0.1$ без уменьшения оптической плотности в центре линии поглощения αL_{peak} .

При реализации ROSE-протокола после сигнального импульса в кристалл подавались два рефазировочных импульса с одинаковой несущей частотой, которая совпадала с центральной частотой оптического перехода ω_0 . В наших экспериментах параметры рефазировочных лазерных импульсов задавались в таком же виде (ур. (1), (2)) с параметрами $\beta = 2\pi \times 50\text{ кГц}$ и $\mu = 10$, так, чтобы спектральный интервал протяжки частоты контролирующих импульсов перекрывал спектр сигнального импульса (250 кГц). После применения первого рефазировочного импульса в спектре поглощения (синяя кривая на рис. 4а) наблюдается значительная инверсия населенности оптического перехода в ансамбле ионов эрбия внутри интервала частотных отстроек от -0.5 МГц до 0.5 МГц . После воздействия второго рефазировочного импульса наблюдалось восстановление поглощения до уровня $\alpha L \sim 1.0$ внутри рабочей спектральной области сигнальных импульсов ($\sim 250\text{ кГц}$) (см. красную кривую на рис. 4а). Этот уровень поглощения соответствовал просветлению оптического перехода, при котором нет инверсии атомного перехода. Поэтому в данных условиях не происходило усиление ROSE-сигнала при его распространении в такой

среде и, соответственно, в нем не появлялись дополнительные квантовые шумы, вызываемые эффектом усиления сигнала эха.

Стоит также отметить, что внутри спектральной области сигнальных импульсов, величина поглощения остается почти постоянной при использовании контролируемых лазерных импульсов с амплитудной и частотной модуляцией, что обеспечивало сохранение временной формы эхо-сигнала. На приграничных областях спектра присутствуют области остаточного просветления, которые мало влияют на спектральную дисперсию, но вносят вклад в оптический квантовый шум, вызываемый люминесценцией ионов, находящихся в этом диапазоне спектра. Вместе с тем, благодаря подготовленной структуре линии поглощения, отношение интегральных величин поглощения областей остаточного просветления в спектральном диапазоне сигнального импульса $[-0.25\text{ МГц}; 0.25\text{ МГц}]$ и приграничных областей спектра в диапазоне частот $[-0.75\text{ МГц}; -0.25\text{ МГц}]$ и $[0.25\text{ МГц}; 0.75\text{ МГц}]$ (см. рис. 4а) увеличилась в 3 раза по сравнению с аналогичными параметрами работы [20].

На рисунке 5 представлены экспериментальные данные по реализации ROSE протокола для сигнального импульса, имеющего вертикальную $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$ или горизонтальную $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{b}$ поляризацию и содержащего около 10^8 фотонов. Временная форма сигнального импульса задавалась в виде Гауссова профиля с длительностью 4 мкс (черная кривая при $t = 0$ на рис. 5). Непоглощенная часть сигнального импульса

на входе в ячейку ОКП показана красной и синей кривой для вертикальной ($\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$) и горизонтальной ($\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{b}$) поляризации импульса, соответственно. Рефазирующие импульсы подавались в моменты времени $t = 15$ мкс и $t = 45$ мкс (синяя кривая на рис. 5). Эффективность восстановления сигнального импульса η определяется как отношение энергии в сигнале эха к энергии входного импульса. Эффективность восстановления сигнала в проведенных экспериментах составила 17 % для вертикальной и 15 % для горизонтальной поляризации входного импульса (красная и синяя кривая на рис. 5, соответственно) при времени хранения 60 мкс. Время когерентности оптического перехода равнялось $T_M = 123$ мкс ($x = 1.35$), где T_M – время фазовой памяти, определяемого согласно модели фазовой релаксации Мимса [26]. Эффективность восстановления сигнала в реализованном ROSE-протоколе для одинаковой импульсной площади θ_c рефазирующих импульсов, можно оценить с помощью уравнения для импульсной площади ROSE сигнала [17], решение которого имеет следующий вид в рассматриваемом случае ортогонального направления распространения сигнального и рефазирующих импульсов

$$\eta(\alpha L, \theta_c) = e^{-2\left(\frac{2\tau}{T_M}\right)^x} \sin^8 \frac{\theta_c}{2} F(\alpha L, \theta_c)^2, \quad (4)$$

где функция $F(\alpha L, \theta) = \alpha L \frac{\text{Sh}\left\{\frac{\alpha L}{4} \sin^2 \theta_c\right\}}{\left\{\frac{\alpha L}{4} \sin^2 \theta_c\right\}} e^{-\frac{(1+\cos^2 \theta_c)\alpha L}{4}}$ характеризует излучение сигнала эха с фазирующейся компонентой резонансной поляризации, максимум амплитуды которой в среде пропорционален $e^{-\left(\frac{2\tau}{T_M}\right)^x} \sin^4 \frac{\theta_c}{2}$. Отметим, что в пределе $\theta_c \rightarrow \pi$ (случай идеальных рефазирующих импульсов) решение (4) описывает известный случай максимально возможной эффективности ROSE-сигнала $\eta_{\max}(\alpha L) = (\alpha L)^2 e^{-\alpha L} e^{-2\left(\frac{2\tau}{T_M}\right)^x}$ [27], которая не превышает 25 % при $\alpha L = 1.65$, $T_M = 123$ мкс ($x = 1.35$), $\tau = 30$ мкс из-за влияния перепоглощения сигнала эха в среде. Анализ (4) показывает, что небольшое отклонение θ_c от π слабо влияет на эффективность протокола. Экспериментально полученные значения эффективности восстановления для двух ортогональных поляризаций световых импульсов составили $\eta(\alpha L, \theta_c) = 0.15$ и 0.17 , которые соответствуют импульсной площади контролирующих импульсов $\theta_c \approx 0.7\pi$. Для проверки этого значения мы независимо оценили эффективность рефазирующих импульсов по измерению поглощения с помощью пробного излучения (рис. 4а), подаваемого на кристалл после первого и второго контролирующих импульсов, что привело к близкой величине $\theta_c \approx 0.66\pi$.

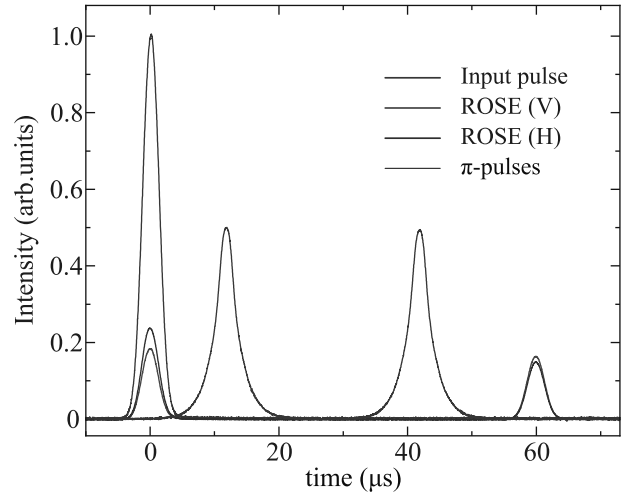


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сигнал восстановления подавленного эха (красная и синяя кривые при $t = 60$ мкс), полученный в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$, $\lambda \sim 1538.35$ нм, $H = 3.39$ Тл, $T = 1.3$ К). Синяя кривая соответствует горизонтальной поляризации сигнального излучения ($\mathbf{k}_{Es} \parallel \mathbf{D}_1 \parallel \mathbf{H}$, $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{b}$), красная – вертикальной поляризации ($\mathbf{k}_{Es} \parallel \mathbf{D}_1 \parallel \mathbf{H}$, $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$). Эффективность восстановления эха составила 17 % в случае вертикальной поляризации и 15 % в случае горизонтальной поляризации для времени хранения 60 мкс. При $t = 0$ показан входной импульс (черная сплошная кривая) и его непоглощенная кристаллом часть (синяя и красная сплошные кривые для горизонтальной и вертикальной поляризации, соответственно)

Эта оценка указывает на надежность полученных результатов и вселяет уверенность на возможность дальнейшего улучшения базовых параметров ROSE-протокола и на перспективы его использования в эффективном сохранении поляризационных состояний света [28, 29].

Далее был реализован ROSE-протокол ОКП для входного сигнального импульса, который в среднем содержал ~ 38 фотонов. На рисунке 6 представлены гистограммы отсчетов однофотонного детектора, усредненных по времени накопления 17 мин. Черная кривая при $t = 0$ мкс соответствует входному сигнальному импульсу. После применения двух рефазирующих импульсов в моменты времени $t = 15$ мкс и $t = 45$ мкс наблюдался ROSE-сигнал (красная кривая в момент времени $t = 60$ мкс), который в среднем содержал около 6 фотонов. Эффективность восстановления сигнала эха составила 15 %, что совпадает с эффективностью восстановления интенсивных импульсов (см. рис. 5). Квантовый шум за время длительности сигнала эха (4 мкс) содержал в среднем 4.5 фотона. Эти экспериментальные данные показывают, что возникающий оптический кванто-

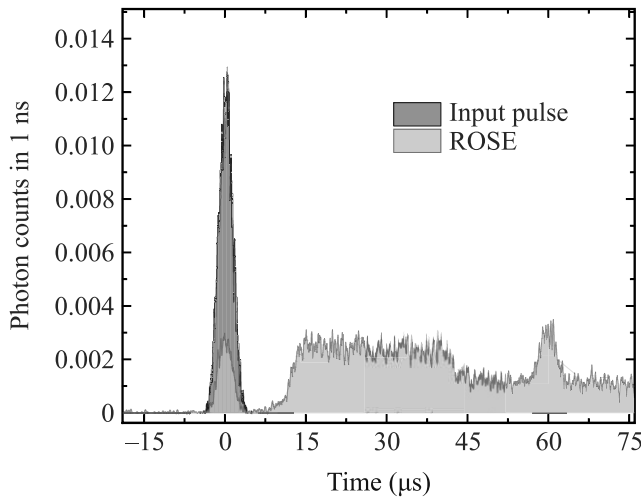


Рис. 6. (Цветной онлайн) Гистограмма отсчетов однофотонного детектора. Входной импульс ($\mathbf{k}_{Es} \parallel \mathbf{D}_1 \parallel \mathbf{H}$, $\mathbf{E}_s \parallel \mathbf{D}_2$) показан черной гистограммой при $t = 0$ (38 фотонов в среднем за 4 мкс). Непоглощенная часть входного сигнала (гистограмма красного цвета при $t = 0$ мкс) содержала около 9 фотонов. Сигнал восстановленного эха (гистограмма красного цвета при $t = 60$ мкс, 6 фотонов в среднем за 4 мкс). Эффективность восстановления сигнала эха составила 15.9%. Шум от спонтанного излучения за время излучения эхо сигнала (4 мкс) содержал в среднем 4.5 фотона. При использовании одного рефазировующего импульса в шуме содержалось ~ 9.3 фотона за 4 мкс

вый шум обусловлен лишь спонтанным излучением ионов, оставшихся в возбужденном состоянии после действия двух не идеальных рефазировующих импульсов. Стоит отметить, что уменьшение эффективности восстановления входного сигнала в этой работе по сравнению с результатами работы [20] в основном связано с уменьшением времени когерентности оптического перехода и уменьшением импульсной площади рефазировующих импульсов. При этом предложенное приготовление начального состояния ионов эрбия позволило в 10 раз понизить уровень квантового шума ROSE-протокола, что открывает новые возможности в его дальнейшем совершенствовании.

В данной работе был экспериментально реализован протокол оптической квантовой памяти в модифицированной схеме восстановления сигнала подавленного эха (ROSE-протокола). Благодаря инициализации начальной линии поглощения и применения ортогональной геометрии распространения сигнала и рефазировующих полей, был уменьшен уровень оптического квантового шума, вызванный спонтанным излучением ионов находящихся в возбужденном состоянии, почти в 10 раз по сравнению с

результатами работы [20], полученными для ROSE-протокола. Также стоит отметить, что реализованная схема оптической квантовой памяти позволяет сохранять произвольную поляризацию сигнального импульса. Для дальнейшего улучшения базовых параметров в сохранении сигнального импульса, в том числе, увеличения отношения сигнал-шум, можно предложить несколько способов. Во-первых, рефазирование когерентности оптического перехода можно произвести на опустошенных уровнях оптического перехода с применением дополнительных световых импульсов (например, на переходе $-|5/2\rangle_g - |5/2\rangle_e$). В работе [30] в кристалле $\text{Eu}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ было показано, что рефазирование когерентности на смежном к сигнальному переходу и использование селективного фильтра в таком же кристалле уменьшает квантовые шумы во время излучения сигнала подавленного эха более чем в 600 раз, при этом время когерентности между сверхтонкими состояниями ионов эрбия может достигать значений порядка секунд [23]. Во-вторых, на этих переходах можно также применить последовательность радиочастотных импульсов динамической развязки [31–33], что позволит значительно увеличить время жизни ОКП, необходимой для применения в квантовом повторителе. В-третьих, увеличение эффективности восстановления входного сигнала возможно при использовании кристалла $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ лучшего качества для увеличения времени когерентности оптического перехода. Так при схожих экспериментальных условиях в работах [23, 34] было показано, что время когерентности оптического перехода составляет $T_2 \sim 1$ мс. Дальнейшее увеличение эффективности ($\eta > 64\%$) возможно при помещении кристалла в оптический резонатор в режиме высокоточного согласования связи. Также отметим, что в этом кристалле были созданы интегральные структуры, такие как фотонно-кристаллический резонатор [35, 36] и волноводные структуры, изготовленные с помощью метода фемтосекундной лазерной печати, с волоконным вводом/выводом излучения [37]. Последние можно считать полноценным интегральным устройством ОКП, поскольку потери на прохождение составляют менее 50 %. Такие устройства могут быть успешно интегрированы в существующие линии квантовых коммуникаций.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект # 21-72-00115).

1. K. Heshami, D. G. England, P. C. Humphreys, P. J. Bustard, V. M. Acosta, J. Nunn, and B. J. Sussman, *J. Mod. Opt.* **63**, 2005 (2016).

2. N. Sangouard, C. Simon, H. de Riedmatten, and N. Gisin, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 33 (2011).
3. F. Bussi eres, N. Sangouard, M. Afzelius, H. De Riedmatten, and W. Tittel, *J. Mod. Opt.* **60**, 1519 (2013).
4. T. Chaneli ere, G. H etet, and N. Sangouard, *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics* **67**, 77 (2018).
5. A.I. Lvovsky, B.C. Sanders, and W. Tittel, *Nat. Photonics* **3**, 706 (2009).
6. S.A. Moiseev and S. Kroll, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 173601 (2001).
7. W. Tittel, M. Afzelius, T. Chaneli ere, R.L. Cone, S. Kr oll, S.A. Moiseev, and M. Sellars, *Laser Photonics Rev.* **4**, 244 (2009).
8. V. Damon, M. Bonarota, A. Louchet-Chauvet, T. Chaneli ere, and J.-L. Le Gou et, *New J. Phys.* **13**, 093031 (2011).
9. J. Ruggiero, J.-L. Le Gou et, C. Simon, and T. Chaneli ere, *Phys. Rev. A* **79**, 053851 (2009).
10. H. Y. Carr and E. M. Purcell, *Phys. Rev.* **94**, 630 (1954).
11. M. Bonarota, J. Dajczgewand, A. Louchet-Chauvet, J.-L. Le Gou et, and T. Chaneli ere, *Laser Phys.* **24**, 094003 (2014).
12. K.I. Gerasimov, M.M. Minnegaliev, S.A. Moiseev, R.V. Urmancheev, T. Chaneli ere, and A. Louchet-Chauvet, *Opt. Spectrosc.* **123**, 211 (2017).
13. X.-X. Li, P. Zhou, Y.-H. Chen, and X. Zhang, *arXiv:2203.03887v2* (2022).
14. V. Ranjan, Y. Wen, A.K.V. Keyser, S.E. Kubatkin, A.V. Danilov, T. Lindstr om, P. Bertet, and S.E. de Graaf, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 180504 (2022).
15. A. Arcangeli, A. Ferrier, and P. Goldner, *Phys. Rev. A* **93**, 062303 (2016).
16. M.M. Minnegaliev, K.I. Gerasimov, R.V. Urmancheev, A.M. Zheltikov, and S.A. Moiseev, *Phys. Rev. B* **103**, 174110 (2021).
17. S.A. Moiseev, M.M. Minnegaliev, E.S. Moiseev, K.I. Gerasimov, A.V. Pavlov, T.A. Rupasov, N.N. Skryabin, A.A. Kalinkin, and S.P. Kulik, *Phys. Rev. A* **107**, 043708 (2023).
18. C. Liu, Z.-Q. Zhou, T. Zhu, L. Zheng, M. Jin, X. Liu, P.-Y. Li, J. Huang, Y. Ma, T. Tu, T.-S. Yang, C.-F. Li, and G. Guo, *Optica* **7**, 192 (2020).
19. J. Dajczgewand, J.-L. Le Gou et, A. Louchet-Chauvet, and T. Chaneli ere, *Opt. Lett.* **39**, 2711 (2014).
20. M.M. Minnegaliev, K.I. Gerasimov, T.N. Sabirov, R.V. Urmancheev, and S.A. Moiseev, *JETP Lett.* **115**, 720 (2022).
21. F. De Seze, F. Dahes, V. Crozatier, I. Lorget e, F. Bretenaker, and J.L. Le Gou et, *Eur. Phys. J. D* **33**, 343 (2005).
22. F. K onze, Y. Sun, W. Thiel, L. Cone, W. Equall, L. Hutcheson, and M. Macfarlane, *Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys.* **68**, 1 (2003).
23. M. Ran ci , M.P. Hedges, R.L. Ahlefeldt, and M.J. Sellars, *Nat. Phys.* **14**, 50 (2017).
24. J.S. Stuart, M. Hedges, R. Ahlefeldt, and M. Sellars, *Phys. Rev. Res.* **3**, L032054 (2021).
25. S. Yasui, M. Hiraishi, A. Ishizawa, H. Omi, T. Inaba, X. Xu, R. Kaji, S. Adachi, and T. Tawara, *Optics Continuum* **1**, 1896 (2022).
26. W.B. Mims, *Phys. Rev.* **168**, 370 (1968).
27. N. Sangouard, C. Simon, M. Afzelius, and N. Gisin, *Phys. Rev. A* **75**, 032327 (2007).
28. T.-X. Zhu, C. Liu, M. Jin, M.-X. Su, Y.-P. Liu, W.-J. Li, Y. Ye, Z.-Q. Zhou, C.-F. Li, and G.-C. Guo, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 180501 (2022).
29. B.I. Bantysh, K.G. Katamadze, Y.I. Bogdanov, and K.I. Gerasimov, *JETP Lett.* **116**, 29 (2022).
30. Y.-Z. Ma, M. Jin, D.-L. Chen, Z.-Q. Zhou, C.-F. Li, and G.-C. Guo, *Nat. Commun.* **12**, 4378 (2021).
31. G. Heinze, C. Hubrich, and T. Halfmann, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 033601 (2013).
32. Y. Ma, Y.-Z. Ma, Z.-Q. Zhou, C.-F. Li, and G.-C. Guo, *Nat. Commun.* **12**, 2381 (2021).
33. S.A. Moiseev and V.A. Skrebnev, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **48**, (2015).
34. M. Ran ci , *High resolution spectroscopy of erbium solids. PhD thesis*, Australian National University, Canberra (2018); doi: 10.25911/5d67b2f1ee8f3.
35. A.M. Dibos, M. Raha, C.M. Phenicie, and J.D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 243601 (2018).
36. S. Chen, M. Raha, C.M. Phenicie, S. Ourari, and J.D. Thompson, *Science* **370**, 592 (2020).
37. D. Liu, P.-Y. Li, T. Zhu, L. Zheng, J. Huang, Z.-Q. Zhou, C.-F. Li, and G.-C. Guo, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 210501 (2022).

Использование флуоресцентного красителя для управления лазерным поглощением в фемтосекундной лазерной нанохирургии клеток

Д. Ю. Мартиросян⁺, А. А. Осыченко⁺¹⁾, А. Д. Залесский⁺, О. Т. Калинина⁺, У. А. Точило⁺, Ю. А. Федотов⁺*, М. С. Сырчина⁺, В. А. Надточенко⁺

⁺ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, 119991 Москва, Россия

* Федеральное государственное бюджетное учреждение “Государственный научный центр Российской Федерации –
Федеральный медицинский биофизический центр имени А. И. Бурназяна”, 123098 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 февраля 2023 г.

После переработки 2 апреля 2023 г.

Принята к публикации 24 апреля 2023 г.

Использование специфических флуоресцентных красителей способно снизить порог ионизации меченых клеточных структур при фемтосекундном лазерном воздействии. Эта особенность может применяться в рамках лазерной нанохирургии клетки. В этой работе мы используем краситель BioTracker Blue в качестве фотосенсибилизатора, чтобы получить точный контроль абляции цитоплазматической мембраны фемтосекундным лазером и облегчить слияние клеток, индуцированное лазером. Мы обнаружили, что BioTracker Blue (366/441) увеличивает эффективность поглощения лазера с длиной волны 760 и 730 нм. Однако повышение эффективности поглощения, обусловленное окрашиванием BioTracker Blue, не улучшало эффективность слияния клеток в модельных системах: парах суспендированных клеток A549, ооцитов и их полярных телец, двухклеточных эмбрионов.

DOI: 10.31857/S1234567823110125, EDN: djxyhu

Появление фемтосекундных источников лазерного излучения стало ключевым фактором развития биофотоники, а именно, лазерной нанохирургии клетки. В настоящее время фемтосекундная лазерная нанохирургия применяется во многих областях, в том числе и в биомедицине [1]. Одной из наиболее значительных задач является клонирование животных и заместительная митохондриальная терапия человека [2, 3]. Оба этих подхода требуют переноса ядра, который обычно осуществляется путем инъекции донорного ядра [4–6] или слияния клеток (электрослияние [7, 8], слияние при помощи вируса [9–11], химическое слияние с применением полиэтиленгликоля). [12]). Лазерное слияние клеток может быть альтернативой традиционным методам слияния. Самое главное преимущество – это возможность воздействовать лазером непосредственно на контакт клеток, при этом сами клетки остаются практически без воздействия.

Взаимодействие фемтосекундного лазерного излучения с биологическим материалом клетки носит сложный, нелинейный (по интенсивности) и случай-

ный (зависит от точной локализации воздействия) характер. В общем случае мощность поглощаемого излучения (P) может быть описана следующей зависимостью: $P = \sigma_n \cdot I^n$, где I – пиковая интенсивность лазера, σ_n – сечение поглощения при n -фотонном процессе поглощения, n – степень нелинейности процесса, которая указывает на количество одновременно поглощенных фотонов лазерного излучения. Для несущей длины волны фемтосекундного излучения 800 нм при воздействии на клеточный биоматериал это число лежит в пределах 3–6 [13]. Из формулы видно, что малое изменение интенсивности фемтосекундного лазерного излучения приводит к значительному изменению поглощаемой мощности из-за нелинейного характера процесса поглощения.

Стоит отметить, что при поглощении фемтосекундного лазерного излучения в биоматериале могут происходить химические превращения (образование светопоглощающих центров), что, в свою очередь, может приводить к изменению оптических свойств и изменению степени нелинейности поглощения до 1, т.е. процесс поглощения может стать линейным по интенсивности лазерного излучения [14–16]. Это значительно усложняет контроль процесса деструкции

¹⁾e-mail: alina.chemphys@gmail.com

биоматериала. И далее по цепочке изменяется вероятность образования светопоглощающих центров, что приводит к еще более вариабельному результату разрушения.

Одним из подходов к получению более предсказуемого и контролируемого результата фемтосекундной лазерной хирургии является использование специфичных по локализации светопоглощающих агентов. В качестве таких агентов могут выступать флуоресцентные красители, квантовые точки, наночастицы и др. [17–19]. Для нанохирургии флуоресцентные красители выбирают исходя из двух соображений: 1) они специфически связываются со структурой клетки, на которую направлено воздействие (ДНК, клеточная мембрана и т.д.); 2) спектр поглощения красителя обеспечивает двухфотонное или однофотонное поглощение фемтосекундного лазерного излучения (степень нелинейности $n = 2$ и 1 соответственно). Благодаря такому подходу удается: 1) снизить порог интенсивности лазерного излучения для разрушения выделенной клеточной структуры; 2) повысить степень локализации воздействия, поскольку уменьшенная интенсивность излучения с меньшей вероятностью будет поглощаться неокрашенным материалом клетки, 3) увеличить величину поглощаемой мощности лазера, поскольку $\sigma_2 \gg \gg \sigma_3 \gg \sigma_4 \dots$ Эффективность такого подхода продемонстрирована в нашей работе по энуклеации ооцитов мышей, окрашенных ДНК-связывающим красителем Hoechst 33342, с использованием фемтосекундного лазерного излучения [20].

В данной работе мы продемонстрировали еще одну возможность управления процессом разрушения биологического материала за счет особенностей спектра поглощения флуоресцентного красителя. Мы предполагаем, что флуоресцентный краситель BioTracker Blue, связывающийся с липидами, может способствовать усилению поглощения лазерного излучения цитоплазматической мембраной и тем самым способствовать облегчению слияния клеток. Основываясь на спектре возбуждения красителя BioTracker Blue (максимум – 366 нм), мы предполагаем, что при использовании фемтосекундного лазера с длиной волны в диапазоне 600–800 нм может происходить двухфотонное поглощение. В данной работе мы изучаем влияние BioTracker Blue на эффективность поглощения фемтосекундного лазера с длиной волны 730, 760 и 790 нм цитоплазматической мембраной на модельной системе: суспендированных клетках аденокарциномы человека (A549). Мы предполагаем, что индикатором лазерного поглощения является парогоазовый пузырь, по-

скольку он может возникнуть только при существенном локальном повышении температуры и давления [13]. Стоит отметить, что лазерное поглощение может происходить и без возникновения парогоазового пузыря, но для его появления требуется достаточное количество поглощенной энергии. В данных экспериментах парогоазовый пузырь появлялся как в окрашенных, так и в контрольных образцах. Сам факт появления парогоазового пузыря в эксперименте, его характеристики, такие как время жизни и размер, напрямую связаны с количеством поглощенной энергии. Кроме того, в данной работе изучали влияние красителя на эффективность слияния на различных модельных объектах: парах суспендированных клеток A549, ооцитах мыши и их полярных тельцах, двухклеточных эмбрионах мыши.

Для проведения экспериментов использовались фемтосекундные лазерные импульсы (частота следования 80 МГц, энергия до 30 нДж), генерируемые перестраиваемым лазером (Chameleon, Coherent). Средняя мощность излучения перед объективом микроскопа не превышала 400 мВт и регулировалась с помощью поляризатора и полуволновой пластинки. Фемтосекундные импульсы были заведены в инвертированный микроскоп (Olympus IX71) с помощью зеркала (10B20UF.25, Newport), установленного под углом 45°, а затем сфокусированы объективом микроскопа (LUCPlanFLN 60x 0.7 NA, Olympus) на объект изучения. Лазерный луч полностью заполнял входной зрачок объектива. Длительность фемтосекундных импульсов измерялась в предметной плоскости микроскопа с помощью автокоррелятора (Авеста-Проект АА-М) и составляла 100 фс. Общая продолжительность экспозиции контролировалась с помощью механического затвора (SH05, Thorlabs). Частота повторения фемтосекундных лазерных импульсов была настроена с помощью системы выбора импульсов (Pulse Select, APE) до 20 кГц в экспериментах по слиянию клеток A549. Фиксацию изображения и наблюдение за объектами воздействия осуществляли с помощью камеры XIMEA xiQ MQ013MG-ON или XIMEA xiD MD061CU-SY, установленной на микроскопе.

В работе использовали культуру раковых клеток человека A549 (аденокарцинома легкого), полученную от АТСС (Манассас, Вирджиния, США). Протокол ведения клеточной культуры описан в работе [21]. Для лазерных экспериментов клетки, растущие в чашке Петри, обрабатывали 0.25 % раствором трипсина (P034, ПанЭко), центрифугировали 5 мин в микропробирках Eppendorf, супернатант удаляли,

а осадок, содержащий клетки, ресуспендировали в DMEM (11320033, Thermo Fisher Scientific).

Также в экспериментах использовали ооциты и эмбрионы, полученные от самок мышей линии C57Bl/6 возрастом от 6 до 8 недель. Протокол получения двухклеточных эмбрионов описан в работе [22]. Для получения ооцитов со вторым полярным тельцем применяли гаплоидную партеногенетическую активацию путем инкубации ооцитов в среде HTF (MR-070-D, EmbryoMax) с добавлением 5 мМ хлорида стронция (439665, Sigma-Aldrich) и 2 мМ EGTA (E3889, Sigma-Aldrich) в CO₂-инкубаторе с 5 % CO₂ и 37 °C в течение 6 ч, как описано S. Kishigami и T. Wakayama [23]. Эмбрионы и ооциты культивировали в CO₂-инкубаторе с 5 % концентрацией углекислого газа при температуре 37 °C в KSOM (MR-121-D, EmbryoMax) в четырехлуночных планшетах (179830, Nunc).

Во всех экспериментах объекты помещали на покровное стекло толщиной 0.17 мм (Heinz Herenz) в капле среды. Лазерные манипуляции с ооцитами и эмбрионами проводили в среде M2 (M7167, Sigma), а после лазерной обработки объекты культивировали в CO₂-инкубаторе в KSOM. Эксперименты с ресуспендированными клетками A549 проводили в среде DMEM. Во избежание высыхания, клетки помещали в специальную камеру, состоящую из двух покровных стекол со вставками толщиной около 0.5 мм.

Флуоресцентное окрашивание красителем BioTracker 400 Blue Cytoplasmic Membrane Dye (SCT109, Sigma Aldrich) выполняли следующим образом. Перед началом работы готовили рабочий раствор красителя в соответствии с протоколом, предоставленным Sigma Aldrich: перемешивали 5 мкл красителя и 5 мкл буфера на водяной бане с температурой порядка 50 °C. Полученный раствор использовали в соотношении 10 мкл на 1 мл среды. Клетки, эмбрионы и ооциты окрашивали в течение 20 мин в CO₂-инкубаторе и затем сразу использовали в экспериментах (без промывки). Флуоресцентную визуализацию проводили с использованием лазерного сканирующего конфокального микроскопа Zeiss LSM 980 (Carl Zeiss Microscopy, Йена, Германия), 20-кратного объектива Plan-Apochromat (NA = 0.8). Объекты помещали в каплю среды M2 на покровное стекло толщиной 0.17 мм (Zeiss). Однофотонное возбуждение осуществлялось лазером с длиной волны 405 нм. Флуоресценцию регистрировали в диапазоне 413–500 нм.

Для исследования частоты появления парогозовых пузырей в клетках A549 использовали фиксированную энергию импульса 7 нДж для всех длин волн

(790, 760 и 730 нм). Воздействие проводилось однократно, и фиксировался факт появления или отсутствия парогозового пузыря. Для каждой экспериментальной группы было выполнено 300 повторов. Лазер фокусировали на область контакта (слипания) клеток.

Для экспериментов по слиянию клеток параметры лазерного воздействия были выбраны таким образом, чтобы не превышать порог образования парогозового пузыря (значение порога принимается за вероятность появления пузыря в 50 %). С учетом результатов предыдущего этапа работы для клеток A549 были установлены параметры лазерной обработки: для 790 нм – энергия в импульсе 3.2 нДж, 5 повторов на одну пару клеток; для 760 нм – энергия импульса 2.7 нДж, 3 повтора на одну пару клеток; для 730 нм – энергия в импульсе 1.9 нДж, 1 повтор на одну пару клеток. Такой набор параметров лазерного воздействия (энергия импульса, число повторов) для различных длин волн должен был скомпенсировать разницу в частоте образования пузырьков и повысить жизнеспособность клеток после лазерного воздействия. Эксперименты по слиянию двухклеточных эмбрионов мыши и слиянию ооцита с полярным тельцем проводили с частотой повторения импульсов 80 МГц, энергией импульса 0.8 нДж и длительностью пуга 30 мс. Лазер фокусировали на области контакта между двумя клетками, воздействие повторялось до образования первого парогозового пузыря.

Нами была измерена эффективность поглощения лазерного излучения клетками карциномы A549 с флуоресцентным красителем или без него (рис. 1a, b). О том, что имело место лазерное поглощение, свидетельствовало образование парогозового пузыря. Максимум поглощения BioTracker Blue составляет 366 нм, спектр этого красителя показан на рис. 1c. В данной работе использовались длины волн лазера 790, 760 и 730 нм, что соответствует двухфотонному поглощению на длинах волн 395, 380 и 365 нм. Теоретически, поглощение BioTracker Blue должно увеличиваться при уменьшении длины волны с 790 до 730 нм. При воздействии фемтосекундного лазера мог образовываться парогозовый пузырь; типичный парогозовый пузырь показан на рис. 1d. Частота появления парогозового пузыря возрастала с уменьшением длины волны излучения фемтосекундного лазера от 790 до 730 нм как в окрашенных, так и в неокрашенных клетках (рис. 1e). Частота возникновения пузырей в окрашенных клетках была выше, чем в неокрашенных, при длинах волн 730 и 760 нм. Средний диаметр пузырька (рис. 1f) был значительно выше в окрашенных

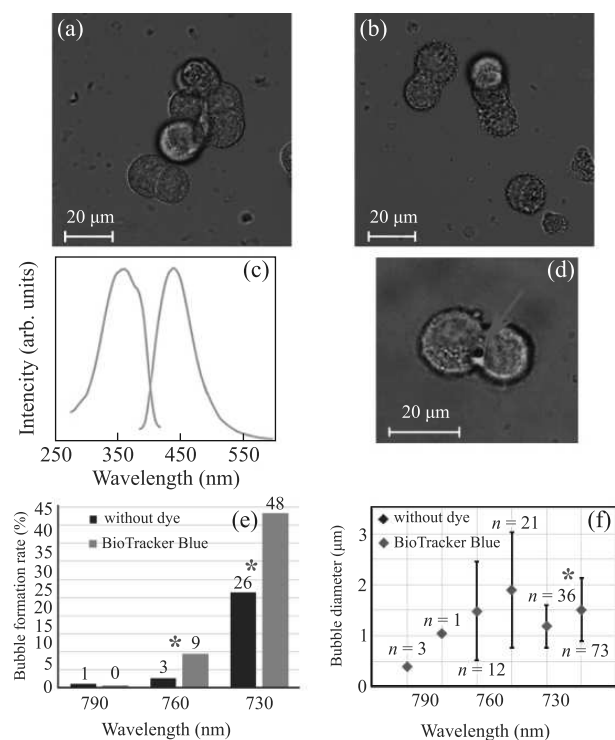


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a), (b) – Конфокальные изображения клеток аденокарциномы A549, окрашенных BioTracker Blue (a) и не окрашенных (b). (c) – Спектры возбуждения/испускания BioTracker Blue. (d) – Парогазовый пузырек (показан стрелкой) в месте контакта двух клеток. (e) – Частота появления пузырьков в зависимости от длины волны в окрашенных и контрольных клетках (* $p < 0.01$; точный критерий Фишера). (f) – средний диаметр пузырьков в окрашенных и контрольных клетках (n – количество пузырьков, усы показывают абсолютную ошибку, * $p < 0.01$; T-тест)

клетках при 730 нм ($p = 0.03$; T-тест), а при 760 нм достоверной разницы не обнаружено ($p = 0.15$; T-тест).

Мы обнаружили, что вероятность появления парогазового пузыря возрастала, если применялся краситель. Это указывает на увеличение степени поглощения излучения, которое наиболее заметно при длине волны 730 нм, что соответствует максимуму двухфотонного возбуждения BioTracker Blue. Таким образом, как и ожидалось, краситель повысил эффективность лазерного поглощения – вероятно, за счет снижения степени нелинейности до двухфотонного процесса.

Затем мы изучили влияние красителя BioTracker Blue на вероятность слияния клеток. В этих экспериментах использовали три типа модельных объектов: пары суспендированных клеток A549 (табл. 1), ооциты с полярными тельцами (табл. 2) и двухклеточные

эмбрионы (табл. 3). Во всех сериях экспериментов применяли лазерное излучение с длинами волн 790, 760 и 730 нм и изучали эффективность слияния в образцах с окрашиванием или без окрашивания (контроль). В результате лазерного воздействия мы наблюдали три возможных последствия (рис. 2): слияние клеток, разрушение клеток или отсутствие эффекта (объекты не слились и остались целыми). Для оценки жизнеспособности клеток A549 мы применяли пропидиум йодид (P1304MP, Invitrogen) в конечной концентрации 10 мкМ (рис. 3). Клетки визуализировали под конфокальным микроскопом Carl Zeiss LSM 980 при помощи лазера с длиной волны 488 нм. Флуоресценцию пропидиум йодида регистрировали в диапазоне 550–700 нм.

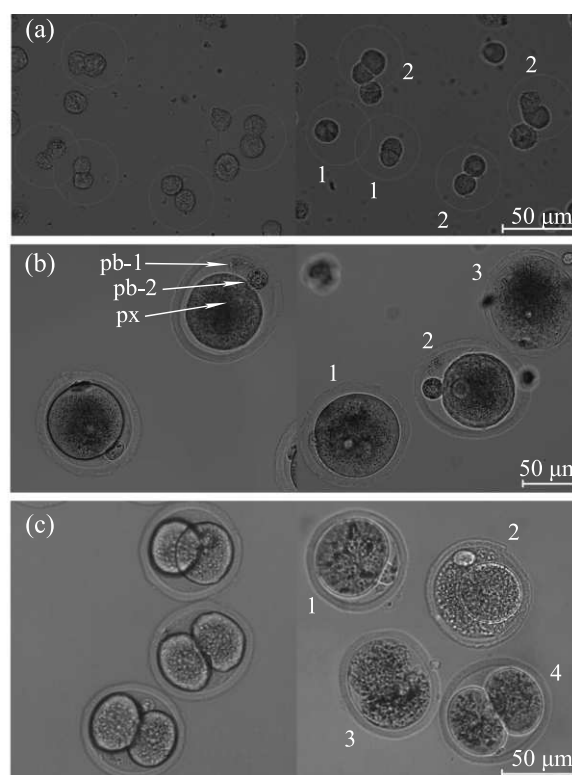


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Суспендированные клетки A549. Слева – сразу после лазерного воздействия, справа – через 40 мин после лазерного воздействия (1 – слившиеся клетки, 2 – неслившиеся клетки). (b) – Гаплоидные эмбрионы мыши до (слева) и после (справа) лазерного воздействия (px – пронуклеус, pb-1 – первое полярное тельце, pb-2 – второе полярное тельце, 1 – слившийся ооцит, 2 – не слившийся ооцит, 3 – разрушенный ооцит). (c) – Двухклеточные эмбрионы мыши до (слева) и после (справа) лазерного воздействия (1 – слитый эмбрион, 2 – эмбрион с разрушением одного blastomera, 3 – полностью разрушенный эмбрион, 4 – не слитый эмбрион)

Таблица 1. Слияние клеток A549

Длина волны	Не окрашенные (контроль)		BioTracker Blue	
	Слияние (<i>N</i> слитых/ <i>N</i> пар)	Другое	Слияние (<i>N</i> слитых/ <i>N</i> пар)	Другое
790 нм	3/43 (21 %)	32 не слитых, 8 разрушенных	2/47 (22 %)	29 не слитых, 6 разрушенных
760 нм	4/40 (10 %)	30 не слитых, 6 разрушенных	3/44 (7 %)	36 не слитых, 5 разрушенных
730 нм	3/45 (7 %)	36 не слитых, 6 разрушенных	3/47 (6 %)	32 не слитых, 12 разрушенных

Таблица 2. Слияние ооцитов и полярных телец

Длина волны	Не окрашенные (контроль)		BioTracker Blue	
	Слияние (<i>N</i> слитых/ <i>N</i> ооцитов)	Другое	Слияние (<i>N</i> слитых/ <i>N</i> ооцитов)	Другое
790 нм	3/28 (10 %)	20 не слитых, 5 разрушенных	6/35 (17 %)	18 не слитых, 11 разрушенных
760 нм	3/31 (10 %)	23 не слитых, 5 разрушенных	4/29 (14 %)	14 не слитых, 11 разрушенных
730 нм	8/33 (24 %)	9 не слитых, 16 разрушенных	13/41 (32 %)	10 не слитых, 18 разрушенных

Мы сравнили эффективность слияния между разными экспериментальными группами (в зависимости от длины волны и присутствия красителя). Точный критерий Фишера не выявил достоверной разницы между вероятностью слияния во всех экспериментальных группах ($p > 0.05$ во всех парах сравнения). Мы не обнаружили влияния окрашивания BioTracker Blue, а также влияния длины волны на эффективность слияния во всех экспериментах со всеми нашими модельными объектами: клетками аденокарциномы (рис. 2а), ооцитами и их полярными тельцами (рис. 2b) и двухклеточными эмбрионами мыши (рис. 2с).

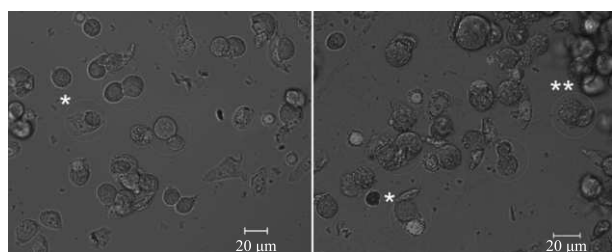


Рис. 3. (Цветной онлайн) Клетки A549 через 1 ч после лазерного воздействия. Справа – клетки, окрашенные BioTracker Blue, слева – клетки без окрашивания. Обведены пары клеток, которые подвергались воздействию лазером, * – разрушенные клетки, ** – слившиеся клетки. Красный цвет свидетельствует о люминесценции пропидиум йодида, локализованного в ядрах поврежденных клеток

Исследование, проведенное Kuetemeyer K. et al., предполагает, что успешное слияние клеток сопровождается формированием пароголового пузыря [24]. В нашей предыдущей работе мы также обнаружили, что пароголовый пузырь необходим для слияния двухклеточных эмбрионов мыши под действием фемтосекундного лазера с длиной волны 800 нм [22]. Предполагается, что пузырь перфорирует плазматическую мембрану клетки [25] и таким образом инициирует слияние.

В текущей работе мы выявили, что ни присутствие красителя, ни смена длины волны не смогли повысить вероятность слияния, несмотря на увеличение частоты появления пароголовых пузырей. Отметим, что необходимость в пароголовом пузыре для слияния клеток зависит так же и от свойств объекта. Например, некоторые пары клеток A549 слились даже без пузыря, но двухклеточные эмбрионы без пароголового пузыря не сливались совсем. Следует отметить, что природа и свойства объекта также являются важным фактором эффективности слияния клеток. Например, что касается двухклеточных эмбрионов, линия и возраст мышей способны влиять на вероятность слияния бластомеров, индуцированного лазером [26]. Что касается клеток в суспензии, то мы ранее показали, что способность клеток к слиянию зависит даже от протокола приготовления [27].

Способность индуцировать слияние клеток без пузырька показана Gong J. et al. [28]. Авторы описывают механизм слияния, индуцированного фемто-

Таблица 3. Слияние двухклеточных эмбрионов

Длина волны	Не окрашенные (контроль)		BioTracker Blue	
	Слияние (N слитых/ N эмбрионов)	Другое	Слияние (N слитых/ N эмбрионов)	Другое
790 нм	15/40 (37 %)	10 не слитых, 2 – разрушен один бластомер, 12 – полностью разрушены	24/50 (48 %)	22 не слитых, 1 – разрушен один бластомер, 3 – полностью разрушены
760 нм	22/40 (55 %)	18 не слитых, 1 – полностью разрушен	24/43 (55 %)	23 не слитых, 4 – разрушен один бластомер, 1 – полностью разрушен
730 нм	23/40 (57 %)	14 не слитых, 3 – полностью разрушены	17/41 (41 %)	19 не слитых, 3 – разрушен один бластомер, 2 – полностью разрушены

секундным лазером, основываясь на повышении активности молекул фосфолипидов с последующей дезорганизацией наружных слоев мембран и последующим их слиянием [28]. Известно, что в результате многофотонной ионизации образуется плазма низкой плотности, и она состоит из радикалов и свободных электронов [13]. Краситель, связанный с цитоплазматической мембраной, может продуцировать дополнительные свободные радикалы за счет двухфотонного поглощения. Возможно, окисление и/или распад липидов в результате фотолиза в области лазерной обработки также может нарушать образование пор и слияние клеток.

Следует отметить, что все флуоресцентные красители имеют специфические спектры поглощения. Это означает, что эти спектры неоднородны и разные длины волн электромагнитного излучения поглощаются с разной эффективностью. С точки зрения нелинейности процесса поглощения лазерного излучения, использование флуоресцентного красителя позволило снизить показатель нелинейности n . И в то же время, мы получаем возможность изменять значение σ в формуле $P = \sigma \cdot I^n$ за счет изменения длины волны лазерного излучения. Современные источники фемтосекундного лазерного излучения позволяют перестраивать длину волны в значительном диапазоне (690–1000 нм). Видно, что σ линейно влияет на величину поглощаемой мощности лазерного излучения, поэтому влияние изменения длины волны лазера на величину поглощаемой мощности носит плавный характер (согласуется со спектром поглощения флуоресцентного красителя). Необходима дальнейшая работа в этом направлении для улучшения понимания механизмов фемтосекундного лазерного воздействия на биологические структуры и повышения эффективности лазерной нанохирургии в целом.

Заключение. Мы рассмотрели использование флуоресцентных красителей как метод управления

количеством поглощаемой энергии при фемтосекундной лазерной микро- и нанохирургии. Мы показали, что краситель BioTracker Blue способен усиливать абсорбцию лазерного излучения, что подтверждается увеличением диаметра парогазовых пузырьков и частотой их появления. Однако связь между количеством поглощенной энергии и эффективностью слияния клеток до сих пор остается неясной, и требуется дальнейшая работа в этом направлении. Мы считаем, что оптимизации требует как сам процесс облучения (оптимальные параметры: длина волны, частота повторения, энергия импульса, длительность облучения), так и подбор красителя. Идея использования красителя для управления процессом поглощения фемтосекундного излучения может быть применена в других исследованиях и носит общий характер.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ФИЦ ХФ 506694 и УНУ ФИЦ ХФ РАН 1440743.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 21-75-10155.

1. Y. Quan, H. Bing, and M. Zhuo-Chen, *Micromachines* **13**(10), 1653 (2022).
2. J. Zhang, G. Zhuang, Y. Zeng, J. Grifo, C. Acosta, Y. Shu, and H. Liu, *Reprod. Biomed. Online* **33**, 529 (2016).
3. D. P. Wolf, N. Mitalipov, and S. Mitalipov, *Trends Mol. Med.* **21**(2), 68 (2016).
4. T. Wakayama, A. C. Perry, M. Zuccotti, K. R. Johnson, and R. Yanagimachi, *Nature* **394**(6691), 369 (1998).
5. S. Kamimura, K. Inoue, N. Ogonuki, M. Hirose, M. Oikawa, M. Yo, O. Ohara, H. Miyoshi, and A. Ogura, *Biol. Reprod.* **89**(2), 1 (2013).
6. A. Ogura, K. Inoue, N. Ogonuki, A. Noguchi, K. Takano, R. Nagano, O. Suzuki, J. Lee, F. Ishino, and J. Matsuda, *Biol. Reprod.* **62**(6), 1579 (2000).

7. L. M. Chailakhyan, B. N. Veprintsev, T. A. Sviridova, and V. A. Nikitin, *Biofizika* **32**(5), 874 (1987).
8. I. Wilmut, A. E. Schnieke, J. McWhir, A. J. Kind, and K. H. Campbell, *Nature* **385**(6618), 810 (1997).
9. L. Hyslop, *Methods Mol. Biol.* **1818**, 31 (2018).
10. L. Craven, H. A. Tuppen, G. D. Greggains, S. J. Harbottle, J. L. Murphy, L. M. Cree, A. P. Murdoch, P. F. Chinnery, R. W. Taylor, R. N. Lightowlers, M. Herbert, and D. M. Turnbull, *Nature* **466**(7294), 82 (2010).
11. Z. Liu, Y. Cai, Y. Wang, Y. Nie, C. Zhang, Y. Xu, X. Zhang, Y. Lu, Z. Wang, M. Poo, and Q. Sun, *Cell* **172**(4), 881 (2018).
12. M. Sims and N. L. First, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. Early Ed.* **91**(13), 6143 (1994).
13. A. Vogel, J. Noack, G. Huttman, and G. Paltauf, *Appl. Phys. B: Lasers Opt.* **81**(8), 1015 (2005).
14. A. A. Astaf'ev, A. D. Zalesskii, A. M. Shakhov, A. A. Osychenko, and V. A. Nadtochenko, *High Energy Chem.* **50**, 421 (2016).
15. A. A. Astafiev, A. M. Shakhov, A. A. Osychenko, M. S. Syrchina, A. V. Karmenyan, U. A. Tochilo, and V. A. Nadtochenko, *ACS Omega* **5**(21), 12527 (2020).
16. A. A. Osychenko, A. D. Zalessky, A. M. Shakhov, A. A. Astafiev, M. S. Syrchina, U. A. Tochilo, A. V. Karmenyan, and V. A. Nadtochenko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1410**, 012063 (2019).
17. K. Kuetemeyer, R. Rezgui, H. Lubatschowski, and A. Heisterkamp, *Biomed. Opt. Express* **1**(2), 587 (2010).
18. D. Eversole, K. Subramanian, R. K. Harrison, F. Bourgeois, A. Yuksel, and A. Ben-Yakar, *Sci. Rep.* **10**, 12387 (2020).
19. E. Bergeron, C. Boutopoulos, R. Martel, A. Torres, C. Rodriguez, J. Niskanen, J.-J. Lebrun, F. M. Winnik, P. Sapieha, and M. Meunier, *Nanoscale* **7**(42), 17836 (2015).
20. A. A. Osychenko, A. D. Zalessky, U. A. Tochilo, and D. Yu. Martirosyan, *Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics* **15**(3.2), 317 (2022).
21. A. Zalessky, Y. Fedotov, E. Yashkina, V. Nadtochenko and A. N. Osipov, *Molecules* **26**(13), 4027 (2021).
22. A. A. Osychenko, A. D. Zalessky, A. N. Kostrov, A. V. Ryabova, A. S. Krivocharchenko, and V. A. Nadtochenko, *J. Biomed. Opt.* **22**(12), 1 (2017).
23. S. Kishigami and T. Wakayama, *J. Reprod. Dev.* **53**(6), 1207 (2007).
24. K. Kuetemeyer, A. Lucas-Hahn, B. Petersen, H. Niemann, and A. Heisterkamp, *J. Biomed. Opt.* **16**(8) 088001 (2011).
25. J. Baumgart, W. Bintig, A. Ngezahayo, S. Willenbrock, H. M. Escobar, W. Ertmer, H. Lubatschowski, and A. Heisterkamp, *Opt. Express* **16**(5), 3021 (2008).
26. A. A. Osychenko, A. D. Zalessky, A. S. Krivokharchenko, A. K. Shakhbazian, A. V. Ryabova, and V. A. Nadtochenko, *Quantum Electron.* **45**(5), 498 (2015).
27. A. A. Osychenko, A. D. Zalessky, U. A. Tochilo, D. U. Martirosyan, A. N. Kostrov, and V. A. Nadtochenko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1695**, 012048 (2020).
28. J. Gong, X. Zhao, Q. Xing, F. Li, H. Li, Y. Li, L. Chai, Q. Wang, and A. Zheltikov, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 093901 (2008).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 117

Выпуск 12

25 июня 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Elastic neutrino-atom scattering as a probe of neutrino millicharge and magnetic moment

G. V. Donchenko, K. A. Kouzakov¹⁾, A. I. Studenikin

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

Submitted 3 April 2023
Resubmitted 25 April 2023
Accepted 4 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823120017, EDN: eumylg

The proposals are discussed in the literature to search for light dark matter particles using liquid and solid-state detectors, which make it possible to achieve sensitivity to low-energy signals down to energies of ~ 1 meV (see, for example, [1, 2] and references therein). Such detectors can also be used to study low-energy neutrino scattering, in particular, coherent elastic neutrino-atom scattering (CE ν AS) [3].

As is known, nonzero neutrino masses open a door to neutrino electromagnetic interactions [4]. We analyze the sensitivity of CE ν AS processes in the case of light atoms to such neutrino electromagnetic characteristics as electric charge e_ν (millicharge) and magnetic moment μ_ν . The results of our calculations of differential cross sections for elastic collisions of tritium neutrinos with the H, ^2H , ^3He , and ^4He atomic targets show that the corresponding experiments can achieve sensitivity to e_ν and μ_ν by orders of magnitude better than the available measurements of elastic neutrino-electron and neutrino-nucleus collisions.

The most promising at the moment is the use of a tritium neutrino source with a superfluid helium-4 detector. Such an experiment is already under preparation, and it can achieve the sensitivity to the neutrino magnetic moment at the level of $\sim (2 - 4) \times 10^{-13} \mu_B$ (see [5] for details). It is supposed to involve a cylindrical tritium source with an initial activity of at least 10 MCi that will be surrounded by a cylindrically shaped 1-m³ volume of liquid helium-4 at temperatures as low as few tens of mK. The flux of the tritium $\bar{\nu}_e$ in the liquid helium-4 volume will be at the level of $\sim 10^{13} - 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

Within the Standard Model, the expected average number of CE ν AS events in the helium-4 detector after a 5-year data-taking is $N^{\text{CE}\nu\text{AS}} = 58.9$. Tables 1 and 2 show the $N^{\text{CE}\nu\text{AS}}$ numbers for different nonzero values of μ_ν and e_ν . It should be noted that the amount of

tritium in the upcoming experiment [5] can potentially be increased to reach the activity of 40 MCi. In such a case, the expected number of CE ν AS events scales by a factor of approximately 3.3.

Table 1. The average number of expected CE ν AS events $N^{\text{CE}\nu\text{AS}}$ in a superfluid He-4 detector after 5 years of data collection depending on the μ_ν value (second row, in units of μ_B)

$N^{\text{CE}\nu\text{AS}}$		
$\mu_\nu = 10^{-13}$	$\mu_\nu = 5 \times 10^{-13}$	$\mu_\nu = 10^{-12}$
60.8	80.8	149

Table 2. The same as in Table 1, but depending on the e_ν value (second row, in units of e)

$N^{\text{CE}\nu\text{AS}}$		
$ e_\nu = 10^{-15}$	$ e_\nu = 5 \times 10^{-15}$	$ e_\nu = 10^{-14}$
61.4 ($e_\nu < 0$)	80.6 ($e_\nu < 0$)	126.2 ($e_\nu < 0$)
57.5 ($e_\nu > 0$)	61.3 ($e_\nu > 0$)	87.7 ($e_\nu > 0$)

It follows from Table 2 that the e_ν contribution to the CE ν AS events in the helium-4 detector can be significant, especially in the $e_\nu < 0$ case, even if the $|e_\nu|$ value does not exceed 10^{-14} in units of e . This should be contrasted with the prospected combined limits $-1.8 \times 10^{-14} < e_\nu < 1.8 \times 10^{-14}$ [6] based on the current and future experiments on elastic neutrino-electron and neutrino-nucleus scattering.

The study was supported by a grant from the Russian Science Foundation (project # 22-22-00384). G. V. Donchenko acknowledges the support from the National Center for Physics and Mathematics (Sarov, Russia).

This is an excerpt of the article “Elastic neutrino-atom scattering as a probe of neutrino millicharge and magnetic moment”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023600982

¹⁾e-mail: kouzakov@gmail.com

1. S. M. Griffin, Y. Hochberg, K. Inzani, N. Kurinsky, T. Lin, and T. Chin, *Phys. Rev. D* **103**, 075002 (2021).
2. B. von Krosigk, K. Eitel, C. Enss, T. Ferber, L. Gastaldo, F. Kahlhoefer, S. Kempf, M. Klute, S. Lindemann, M. Schumann, F. Toschi, and K. Valerius, [arXiv:2209.10950 \[hep-ex\]](#).
3. M. Cadeddu, F. Dordei, C. Giunti, K. Kouzakov, E. Picciau, and A. Studenikin, *Phys. Rev. D* **100**, 073014 (2019).
4. C. Giunti and A. Studenikin, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 531 (2015).
5. M. Cadeddu, G. Donchenko, F. Dordei, C. Giunti, K. Kouzakov, B. Lubsandorzhiev, A. Studenikin, V. Trofimov, M. Vyalkov, and A. Yukhimchuk, [arXiv:2302.05307 \[hep-ph\]](#).
6. A. Parada, *Adv. High Energy Phys.* **2020**, 5908904 (2020).

Энергетический спектр β -электронов в безнейтринном двойном β -распаде с учетом возбуждения электронной оболочки атомов

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

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

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

Поступила в редакцию 29 апреля 2023 г.

После переработки 5 мая 2023 г.

Принята к публикации 5 мая 2023 г.

В двойном β -распаде электронная оболочка дочернего атома с высокой вероятностью оказывается в возбужденном состоянии, в результате чего энергия, уносимая β -электронами, испытывает сдвиг в сторону меньших величин. В модели Томаса–Ферми и в релятивистском формализме Дирака–Хартри–Фока найдены среднее значение и дисперсия энергии возбуждения электронной оболочки дочернего атома в двойном β -распаде германия ${}^{76}_{32}\text{Ge} \rightarrow {}^{76}_{34}\text{Se}^* + 2\beta^- (+ 2\nu_e)$. На основании полученных оценок построена двух-параметрическая модель энергетического спектра β -электронов в безнейтринной моде, учитывающая перераспределение энергии реакции между продуктами распада. С вероятностью 90 % сдвиг суммарной энергии β -электронов не превышает 50 эВ. Средняя энергия возбуждения, однако, на порядок выше и равна ~ 400 эВ, в то время как корень из дисперсии равен ~ 2900 эВ, что объясняется, по-видимому, значительным вкладом внутренних электронных уровней в энергетические характеристики процесса. Искажение формы пика $0\nu 2\beta$ -распада необходимо учитывать при анализе данных детекторов с разрешением ~ 100 эВ или выше.

DOI: 10.31857/S1234567823120029, EDN: eutano

В поисках физики за пределами Стандартной Модели (СМ) нейтрино занимают выделенное место. Исследование β -процессов, чувствительных к смешиванию, массе и природе нейтрино (дираковская/майорановская), является перспективным направлением в поиске обобщений СМ [1].

Экспериментальное наблюдение безнейтринного двойного β -распада ($0\nu 2\beta$) однозначно доказало бы существование майорановской массы нейтрино и значительно сузило бы спектр возможностей для обобщения СМ. $0\nu 2\beta$ распад регистрируется по узкому пику при кинетической энергии β -электронов, T , равной энергии распада Q . В β -процессах каналы с электронной оболочкой дочернего атома в основном состоянии не обязательно являются доминирующими [2, 3], что приводит, например, к заметному увеличению вероятности безнейтринного двойного захвата электронов [4–6]. Возбуждения электронной оболочки атомов, так же, как химический сдвиг атомных уровней [7], зависящий от агрегатного состояния вещества, приводят к модификации энергетического спектра, в том числе к размытию и сдвигу $0\nu 2\beta$ пика. Пик при $T = Q$ используется в качестве ин-

дикатора $0\nu 2\beta$ распада, его поиски ведутся коллаборациями CUORE [8], EXO [9], KamLAND-Zen [10]. Многоэлектронные моды могут наблюдаться коллаборацией SuperNEMO [11]. Верхний предел на время полураспада ${}^{76}_{32}\text{Ge} \rightarrow {}^{76}_{34}\text{Se}^* + 2\beta^-$, установленный коллаборацией GERDA, равен 5.3×10^{25} лет с уровнем достоверности 90 % [12]. Интерпретация данных в терминах майорановской массы нейтрино требует контроля неопределенностей в значении аксиальной константы связи нуклонов [13] и в ядерных матричных элементах [14]. В настоящей работе исследуется влияние возбуждения электронной оболочки атомов на спектр β -электронов в двойном β -распаде.

В β -процессах ядро атома претерпевает изменение заряда $\Delta Z = \pm 1, \pm 2$. Изменение заряда действует на электронную оболочку как внезапное возмущение, “встряхивание”, вынуждая электроны дочернего атома с определенной вероятностью переходить на возбужденные уровни (shake up), либо в ионизационные состояния непрерывного спектра (shake off). Результирующий энергетический β -спектр определяется вкладом канала распада, в котором все электроны конечного атома сохраняют свои квантовые числа, а энергия реакции не изменяется, и каналами распада с возбуждением и ионизацией электронной оболоч-

¹⁾e-mail: mikhail.krivoruchenko@itep.ru

ки. Во втором случае эффективная энергия реакции уменьшается, что влияет на форму энергетического спектра.

Для определения энергетического спектра требуется проводить суммирование по всем каналам с учетом измененной энергии реакции и соответствующей многочастичной амплитуды. Волновая функция электронов родительского атома проектируется на волновую функцию электронов дочернего атома в конфигурации, соответствующей определенному возбуждению оболочки. Каждая такая амплитуда требует, вообще говоря, многочастичного численного моделирования. Число открытых каналов, в частности, бесконечно, что является спецификой кулоновской задачи.

Сравнительно просто вычисляется средняя энергия возбуждения оболочки дочернего атома и ее дисперсия в модели Томаса–Ферми и в релятивистском методе Дирака–Хартри–Фока (ДХФ). Эти значения можно далее использовать для построения простейших вероятностных распределений энергии, уносимой β -электронами.

В нерелятивистской теории гамильтониан N электронов в атоме с зарядом ядра Z записывается в виде:

$$\hat{H}_{Z,N} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} \mathbf{p}_i^2 - \frac{Z}{|\mathbf{r}_i|} \right) + \sum_{i < j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1)$$

где $\mathbf{p}_i$ – импульсы и $\mathbf{r}_i$ – координаты электронов. В настоящей работе используется система атомных единиц $\hbar = m = e = 1$, $c = 137$, где m – масса электрона, e – заряд протона, c – скорость света. Основное состояние обозначим $|Z, N\rangle$. Полная энергия связи электронов $E_{Z,N}$ является собственным значением $\hat{H}_{Z,N}$.

В $0\nu 2\beta$ -распаде заряд ядра увеличивается на две единицы. Кулоновская добавка к гамильтониану, действующая как внезапное возмущение, переводит состояние $|Z, Z\rangle$ исходного гамильтониана в суперпозицию состояний с определенной энергией гамильтониана

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

где $r_i = |\mathbf{r}_i|$. Средняя энергия Z электронов, образующих оболочку родительского атома, в кулоновском поле ядра с зарядом $Z+2$ равна $\langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2,Z} | Z, Z \rangle = E_{Z,Z} + 2Z^{-1} E_{Z,Z}^C$, где $E_{Z,Z}^C$ – энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром:

$$E_{Z,Z}^C = -Z \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle. \quad (3)$$

Среднее значение энергии возбуждения электронной оболочки дочернего атома в двойном β -распаде оказывается равным

$$\mathcal{M} = E_{Z,Z} + 2Z^{-1} E_{Z,Z}^C - E_{Z+2,Z}. \quad (4)$$

Энергия связи нейтральных атомов $E_{Z,Z}$ табулирована [15–18], либо находится с помощью программ, предназначенных для расчета структуры электронных оболочек атомов (см., например, [19]). Величина $E_{Z+2,Z}$ отличается от полной энергии связи электронов в нейтральном атоме $E_{Z+2,Z+2}$ на энергию связи двух валентных электронов, которая не превышает 20 эВ. Значения энергии кулоновского взаимодействия $E_{Z,Z}^C$, полученные с помощью релятивистского метода ДХФ, можно найти в работе [18].

В качестве второго момента вероятностного распределения найдем дисперсию энергии возбуждения

$$\mathcal{D} = \langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2}^2 | Z, Z \rangle - \langle Z, Z | \hat{H}_{Z+2} | Z, Z \rangle^2. \quad (5)$$

С учетом уравнения (2) и, принимая во внимание, что $E_{Z,N}$ – собственные значения $\hat{H}_{Z,N}$, находим

$$\frac{1}{4} \mathcal{D} = \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} \frac{1}{r_j} | Z, Z \rangle - \langle Z, Z | \sum_{i=1}^Z \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle^2.$$

В первом слагаемом матричный элемент $i \neq j$ факторизуется, если пренебречь обменными вкладами: $\langle Z, Z | r_i^{-1} r_j^{-1} | Z, Z \rangle \approx \langle Z, Z | r_i^{-1} | Z, Z \rangle \langle Z, Z | r_j^{-1} | Z, Z \rangle$. Факторизация ведет к сокращению недиагональных членов, в результате чего выражение для дисперсии принимает вид:

$$\frac{1}{4} \mathcal{D} \approx \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i^2} | Z, Z \rangle - \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle^2. \quad (6)$$

Оценка обменных эффектов с использованием нерелятивистских волновых функций электронов в формализме Рутаана–Хартри–Фока [17] показывает, что вклад обменных слагаемых в дисперсию не превышает 10%.

Заметим, что уравнения (2)–(6) также справедливы в релятивистской теории с гамильтонианом Дирака–Кулона в качестве нулевого приближения и потенциалом Брейта, описывающим взаимодействие электронов в порядке $1/c^2$ [20].

В модели Томаса–Ферми полная энергия связи и энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром для нейтрального атома даются выражениями $E_{Z,Z} = -0.764 Z^{7/3}$ и $E_{Z,Z}^C = 7 E_{Z,Z} / 3$ (см., например, [21]). Связь между $E_{Z,Z}$ и $E_{Z,Z}^C$ устанавливается теоремой вириала. Средняя энергия возбуждения равна

$$\mathcal{M} = \left(1 + \frac{14}{3Z} \right) E_{Z,Z} - E_{Z+2,Z}. \quad (7)$$

В двойном β -распаде германия каждый из двух недостающих $4p$ электронов связан в селене на 9.752 эВ, сумма первых двух энергий ионизации селена составляет 30.948 эВ [22]. С учетом поправки находим $M = 382$ эВ.

Плотность электронов в модели Томаса–Ферми выражается через волновые функции атомных оболочек согласно

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | Z, Z \rangle. \quad (8)$$

Первое слагаемое в уравнении (6) очевидным образом приводится к виду $\int d\mathbf{r} r^{-2} n(\mathbf{r})$. Для вычисления интеграла используется параметризация экранирующей функции нейтральных атомов, приведенная в работе [23]. На малых расстояниях интеграл расходится как $\sim dr/r^{3/2}$. Кроме того, квазиклассическое приближение ограничено расстояниями $1/Z \lesssim r$. Для численных оценок плотность электронов в интервале от $r = 0$ до $1/Z$ считается постоянной и равной $n(r = 1/Z)$.

К второму слагаемому в уравнении (6) применим известное неравенство, согласно которому среднее арифметическое не превосходит среднее квадратичное:

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle^2 &\geq \left(\frac{1}{Z} \sum_{i=1}^Z \langle Z, Z | \frac{1}{r_i} | Z, Z \rangle \right)^2 = \\ &= \left(\frac{1}{Z} \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} n(\mathbf{r}) \right)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Заметим, что правая часть равна $(Z^{-2} E_{Z,Z}^C)^2$. Неравенство определяет верхнюю границу дисперсии:

$$\frac{1}{4} \mathcal{D} \leq \frac{1}{4} \bar{\mathcal{D}} = \int d\mathbf{r} \frac{1}{r^2} n(\mathbf{r}) - Z^{-1} \left(\int d\mathbf{r} \frac{1}{r} n(\mathbf{r}) \right)^2. \quad (10)$$

Для двойного β -распада германия оценка дает $\bar{\mathcal{D}}^{1/2} = 2160$ эВ.

В релятивистском формализме ДХФ [15] значение первого отрицательного момента в атоме германия равно $\langle r^{-1} \rangle = 4.99$. Расположение основного уровня атома селена относительно германия находится с помощью комплекса программ RAINE [24, 25], реализующих релятивистский метод ДХФ. Подставляя полученные значения в формулу (6), найдем среднее значение энергии возбуждения $M = 300$ эВ, что качественно согласуется с методом Томаса–Ферми. Значения $E_{Z,Z}$ и $E_{Z,Z}^C$, табулированные в работе [18], для двойного β -распада германия дают $M = 400$ эВ.

Аналогично найдем дисперсию (6), выразив ее через первый и второй отрицательные моменты распределения электронов в атоме германия. Воспользовавшись известными значениями вторых моментов распределения электронов в атомах [16], найдем $\mathcal{D}^{1/2} = 2870$ эВ. Сравнение томас-фермиевского значения 2160 эВ с полученным значением также демонстрирует качественное согласие.

Величины M и $\mathcal{D}$ заметно выше ожидаемых для каналов, связанных с возбуждением валентных электронов. Вклад дискретных уровней в M и $\mathcal{D}^{1/2}$, очевидно, не превышает ~ 10 эВ. Сходимость интеграла по непрерывному спектру определяется энергией связи, поэтому вклад континуума в M и $\mathcal{D}^{1/2}$ сравним с вкладом дискретной части спектра. В то же время в вероятности доминируют возбуждения валентных электронов, так как изменение заряда ядра $\Delta Z = 2$ приводит к значительному, в относительных единицах, изменению экранированного потенциала на границе атома.

Электроны на внутренних орбитах возбуждаются с малой вероятностью, однако имеют большую энергию связи и могли бы давать заметный вклад в среднюю энергию возбуждения и дисперсию. Изменение заряда ядра ΔZ много меньше Z , что позволяет применить теорию возмущений для вычисления вероятности возбуждения K электрона в континуум [26, 27] (см. также [21]). В ведущем порядке вероятность, средняя энергия и средний квадрат энергии перехода равны $\Delta \mathcal{P} = 0.65 \Delta Z^2 / Z^2$, $\Delta M = 0.66 \Delta Z^2$ и $\Delta \mathcal{D} = 1.87 \Delta Z^2 Z^2$, соответственно. В двойном β -распаде германия $\Delta \mathcal{P} = 2.6 \times 10^{-3}$, $\Delta M = 72$ эВ и $\Delta \mathcal{D} = (2380 \text{ эВ})^2$. ΔM и $\Delta \mathcal{D}$ имеют порядок величин M и $\mathcal{D}$. Вклад K электронов в среднюю энергию возбуждения и дисперсию, следовательно, является существенным.

В β -процессах оболочка родительского атома с конечной, отличной от единицы вероятностью переходит в основное состояние дочернего атома [2, 3, 28]. Для определения соответствующей амплитуды $K_Z = \langle \text{Se III} | \text{Ge} \rangle$ в двойном β -распаде германия волновые функции электронов атома германия $|\text{Ge}\rangle$ и волновые функции дочернего иона селена в основном состоянии $|\text{Se III}\rangle$ строились с использованием пакета программ GRASP-2018, реализующих релятивистский метод ДХФ [19, 20]. Величина K_Z оказывается чувствительной к используемым приближениям, что обусловлено заметным отличием энергии связи электронов с одинаковыми квантовыми числами на внешних оболочках германия и селена. Вычисления на основе GRASP-2018 приводят к значению $K_Z = 0.575$.

Суммарная кинетическая энергия β -электронов с учетом потери энергии на возбуждение и ионизацию дочернего атома в окрестности $T = Q$ описывается вероятностным распределением

$$dF(T) = (K_Z^2 \delta(T - Q) + (1 - K_Z^2)w(1 - T/Q)/Q) dT, \quad (11)$$

где K_Z^2 – вероятность электронам родительского атома после распада остаться в основном состоянии. Функция $w(x)$ – плотность вероятности энергии возбуждения электронной оболочки дочернего атома $\epsilon = Q - T$, измеренной в единицах Q . Второе слагаемое приводит к размытию пика.

Средняя величина, дисперсия и амплитуда перекрытия K_Z достаточны, чтобы построить простейшее двух-параметрическое вероятностное распределение энергии β -электронов. В широком круге задач, связанных со случайными процессами, используется бета-распределение [29]

$$w(x) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1} \quad (12)$$

для величин x , принимающих значения на отрезке $[0, 1]$; $\alpha, \beta > 0$ – свободные параметры. В бета-распределении среднее и средний квадрат равны $m = \alpha/(\alpha + \beta)$ и $m_2 = \alpha(\alpha + 1)/((\alpha + \beta)(\alpha + \beta + 1))$, соответственно. В рассматриваемом случае $x = \epsilon/Q$. Равенства $(1 - K_Z^2)m = M/Q$ и $(1 - K_Z^2)m_2 = (\mathcal{D} + M^2)/Q^2$ позволяют определить параметры α и β по известным значениям M , $\mathcal{D}$ и K_Z . В качестве примера рассмотрим изотоп германия-76, использовавшийся в экспериментах коллаборации GERDA. Для $M = 300$ и 400 эВ и дисперсии $\mathcal{D}^{1/2} = 2870$ эВ находим $\alpha = 0.016$, $\beta = 74$ и $\alpha = 0.029$, $\beta = 99$, соответственно. Двух-параметрическое гамма-распределение [29], описывающее случайные величины на полуоси $[0, +\infty)$, также подходит для моделирования, поскольку условие $Q \gg M$, $\mathcal{D}^{1/2}$ позволяет распространить интегрирование по $x = \epsilon/Q$ на всю полуось $[0, +\infty)$. В физически интересной области $T \sim Q$ бета- и гамма-распределения практически совпадают в силу $\beta \gg 1$.

При $T = Q$ плотность вероятности сингулярна, но интегрируема. На рисунке 1 для двух приведенных выше наборов параметров α, β показана функция распределения

$$F(T) = K_Z^2 + (1 - K_Z^2) \int_T^Q w(1 - T'/Q) dT'/Q, \quad (13)$$

которая определяет вероятность двум β -электронам иметь энергию, отличную от величины Q не более, чем на $Q - T > 0$. Для $M = 300$ эВ с вероятностью 90 % энергия β -электронов отклоняется от Q

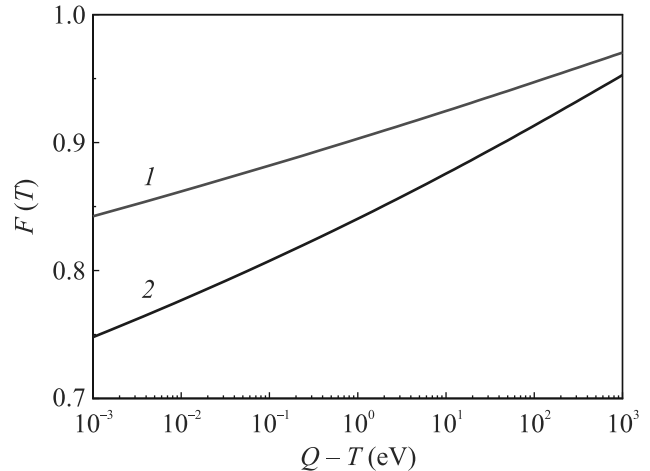


Рис. 1. Функция распределения вероятности кинетической энергии β -электронов, T , с учетом неполного перекрытия электронных оболочек атомов согласно уравнению (13). Линии 1 и 2 отвечают средней энергии возбуждения электронной оболочки $M = 300$ и 400 эВ, соответственно, и значению дисперсии $\mathcal{D}^{1/2} = 2870$ эВ. Численные значения характеризуют двойной β -распад германия, $Q = 2039.061(7)$ кэВ – энергия реакции [12]

не более, чем на 1 эВ. Для $M = 400$ эВ с той же вероятностью отклонение меньше 50 эВ. С увеличением разности $Q - T$ вероятность растет примерно логарифмически, то есть достаточно медленно. Современные детекторы измеряют энергию, выделяемую в двойном β -распаде, с разрешением ~ 1 кэВ, что существенно затрудняет наблюдение эффектов, связанных с возбуждением электронных оболочек. Процессы встряхивания K электронов сопровождаются выделением энергии ~ 10 кэВ, однако, эти процессы маловероятны.

Таким образом, в β -процессах электронная оболочка дочернего атома с высокой вероятностью переходит в возбужденное состояние. В вероятности доминируют переходы валентных электронов на свободные дискретные уровни или в непрерывный спектр. В настоящей работе даны оценки средней энергии возбуждения электронной оболочки дочернего атома M и ее дисперсии $\mathcal{D}$ в модели Томаса–Ферми и в релятивистском формализме Дирака–Хартри–Фока. Найденные значения $M \sim 400$ эВ и $\mathcal{D}^{1/2} \sim 2900$ эВ существенно превышают значения, характеризующие процессы с участием валентных электронов. Оценка энергетических параметров перехода K электронов в непрерывный спектр указывает на то, что заметный вклад в среднюю энергию и ее дисперсию дают редкие процессы встряхивания электронов, заселяющих внутренние орбиты. При увеличении разрешения детекторов до ~ 100 эВ

искажение формы пика в распаде $0\nu 2\beta$, вызванное возбуждением электронных оболочек атомов, становится существенным для анализа данных наблюдений.

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

1. S. Bilenky, *Introduction to the Physics of Massive and Mixed Neutrinos*, 2nd ed., Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Berlin (2018), v. 947.
2. W. Bambynek, H. Behrens, M. H. Chen, B. Crasemann, M. L. Fitzpatrick, K. W. D. Ledingham, H. Genz, M. Mutterer, and R. L. Intemann, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 77 (1977).
3. M. I. Krivoruchenko and K. S. Tyrin, *Eur. Phys. J. A* **56**, 16 (2020).
4. F. F. Karpeshin, M. B. Trzhaskovskaya, and L. F. Vitushkin, *Yad. Fiz.* **83**, 344 (2020) [*Phys. At. Nucl.* **83**, 608 (2020)].
5. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, *Yad. Fiz.* **85**, 347 (2022) [*Phys. At. Nucl.* **85**, 474 (2022)].
6. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, *Phys. Rev. C* **107**, 045502 (2023).
7. I. Lindgren, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **137–140**, 59 (2004).
8. K. Alfonso, D. R. Artusa, F. T. Avignone et al. (CUORE Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **115**, 102502 (2015).
9. G. Anton, I. Badhrees, P. S. Barbeau et al. (EXO-200 Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **123**, 161802 (2019).
10. A. Gando, Y. Gando, T. Hachiya et al. (KamLAND-Zen Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **117**, 082503 (2016); Addendum: *Phys. Rev. Lett.* **117**, 109903 (2016).
11. R. Arnold, C. Augier, J. D. Baker et al. (NEMO-3 Collaboration), *Phys. Rev. D* **92**, 072011 (2015).
12. The GERDA Collaboration, *Nature* **544**, 47 (2017).
13. J. T. Suhonen, *Front. Phys.* **5**, 55 (2017).
14. F. Šimkovic, A. Faessler, V. Rodin, P. Vogel, and J. Engel, *Phys. Rev. C* **77**, 045503 (2008).
15. C. C. Lu, T. A. Carlson, F. B. Malik, T. C. Tucker, and C. W. Nestor, Jr., *At. Data Nucl. Data Tables* **3**, 1 (1971).
16. J. P. Desclaux, *At. Data Nucl. Data Tables* **12**, 311 (1973).
17. E. Clementi and C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974).
18. K.-N. Huang, M. Aoyagi, M. H. Chen, B. Grasemann, and H. Mark, *At. Data Nucl. Data Tables* **18**, 243 (1976).
19. K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia, and E. P. Blumner, *Comput. Phys. Commun.* **55**, 425 (1989).
20. I. P. Grant, *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation*, Springer Science + Business Media, N.Y. (2007).
21. L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory. Course of Theoretical Physics*, 3rd ed., Pergamon, London (1977), v. 3.
22. A. Kramida and Yu. Ralchenko, J. Reader and NIST ASD Team (2022), NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10), <https://physics.nist.gov/asd>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>.
23. J. C. Mason, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **84**, 357?360 (1964).
24. I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor Jr., P. O. Tikkanen, and S. Raman, *At. Data Nucl. Data Tables* **81**, 1 (2002).
25. I. M. Band and M. B. Trzhaskovskaya, *At. Data Nucl. Data Tables* **35**, 1 (1986).
26. E. L. Feinberg, *J. Phys. (USSR)* **4**, 423 (1941).
27. А. Мигдал, *ЖЭТФ* **11**, 207 (1941) [A. Migdal, *J. Phys. Acad. Sci. USSR* **4**(1–6), 449 (1941)].
28. Z. Ge, T. Eronen, K. S. Tyrin, J. Kotila et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 272301 (2021).
29. В. С. Королюк, Н. И. Портенко, А. В. Скороход, А. Ф. Турбин, *Справочник по теории вероятностей и математической статистике*, Наука М. (1985), 640 с.

Light-shining-through-wall cavity setups for probing ALPs

*D. Salnikov^{+*1)}, P. Satunin⁺, M. Fitkevich^{+×}, D. V. Kirpichnikov⁺*

⁺*Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences, 117312 Moscow, Russia*

^{*}*Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia*

[×]*Moscow Institute of Physics and Technology, 141701 Dolgoprudny, Russia*

Submitted 30 March 2023

Resubmitted 5 May 2023

Accepted 5 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823120030, EDN: euteax

Light feebly-interacting pseudoscalar particles appear in modern particle physics in various ways. Originally, a pseudoscalar particle called an axion was proposed in late 1970s to explain the strong CP problem in quantum chromodynamics [1]. More general axion-like-particles (ALPs) are motivated by the string theory and appear in its low-energy phenomenological description [2]. In addition to the motivation for the particle physics models, axions and ALPs are of a great interest in cosmology because they could make up a significant fraction of the dark matter in the Universe [3–5].

The Lagrangian for interacting ALPs and photons can be written as follows

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{1}{2}\partial_\mu a \partial^\mu a - \frac{1}{2}m_a^2 a^2 - \frac{1}{4}g_{a\gamma\gamma} a F_{\mu\nu}\tilde{F}^{\mu\nu}, \quad (1)$$

where $F_{\mu\nu}$ is the electromagnetic tensor and $\tilde{F}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}F_{\alpha\beta}$ is its dual, a is the ALP field of mass m_a with dimensionful photon-axion coupling $g_{a\gamma\gamma}$. Generally, m_a and $g_{a\gamma\gamma}$ are treated as independent parameters.

A popular strategy of ALP searches is related to the cosmological (dark matter) and astrophysical probing. These ALPs can be detected by ground-based haloscopes (detection of dark matter ALPs) and helioscopes (ALPs can be produced hypothetically in the Sun) [6] (see, e.g., [7] for a recent review).

Another approach to probing ALPs implies both their production and detection in a laboratory, and usually called Light-Shining-through-Wall (LSW) experiments [8–10]. The LSW setups consist of two cavities separated by a non-transparent wall. ALPs are produced in the first cavity by interaction of electromagnetic field components. Generated ALPs can pass through the wall and convert back to photons in the detection cavity. High intensity of initial electromagnetic field and the resonant amplification for the signal inside the cavi-

ties are required because of the extremely small coupling $g_{a\gamma\gamma}$. Two wavelength ranges of EM fields are applicable to LSW: the optical range setup including high intensity lasers and the radio range setup consisting of radio frequency cavities with high quality factors. Both ideas were realised in the experiments, ALPS (optical) [11] and CROWS (radio) [12]. These experiments set the bound $g_{a\gamma\gamma} \simeq 10^{-7} \text{ GeV}^{-1}$ for a wide range of ALP masses. However, this bound is three orders of magnitude weaker than the CAST helioscope limit $g_{a\gamma\gamma} \lesssim 6 \times 10^{-11} \text{ GeV}^{-1}$, [6]. For the moment, the ALPS-II laser experiment [13] is under construction and its projected sensitivity exceeds CAST level.

In addition, the LSW radio experiments aimed at the ALP searches are of a great interest [14]. Recently, several proposals with LSW radio cavities appeared in the literature including superconducting radio frequency (SRF) cavities [15, 16]. In this letter we compare different LSW cavity setups including modification of the CROWS [12]. Specifically, we study four setups:

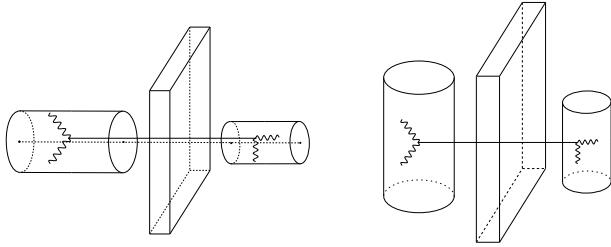
- (i) an electromagnetic pump mode plus static magnetic field in the emitter cavity, static magnetic field in the receiver cavity [10], we call this setup **MF emitter + M*F receiver**;
- (ii) two electromagnetic pump modes in the emitter cavity; an electromagnetic pump mode in the receiver cavity [15], we specify this facility as **MM emitter + M*M receiver**;
- (iii) two electromagnetic pump modes in the emitter cavity, static magnetic field in receiver cavity [16], we label this proposal as **MM emitter + M*F (RF) receiver**;
- (iv) an electromagnetic pump mode plus static magnetic field in the emitter cavity, an electromagnetic pump mode in the receiver cavity, we denote this setup as **MF emitter + M*M receiver**.

Another aspect of our analysis is geometry of the setup which can be adjusted in order to achieve higher sensitivity to ALPs parameters. We study transfer of

¹⁾e-mail: salnikov.dv16@physics.msu.ru

Table 1. Comparison of the characteristics for various experimental setups. The geometrical formfactor $|\mathcal{G}|$ and the setup sensitivity $g_{a\gamma\gamma}$ are presented for the best ratio of R/L of coaxial location and the mass of ALPs $m_a \lesssim \omega_a/2$

Type of the setup	$B_0^{\text{em},(1)}$	$B_0^{\text{em},(2)}$	B_0^{rec}	Q_{rec}	P_{em}	$ \mathcal{G} $	$g_{a\gamma\gamma}$
MF em. + M*F rec.	0.01 T	3 T	3 T	10^5	100 kW	10^{-2}	$3 \times 10^{-11} \text{ GeV}^{-1}$
MM em. + M*M rec.	0.1 T	0.1 T	0.1 T	10^{10}	0.1 kW	10^{-3}	$5 \times 10^{-11} \text{ GeV}^{-1}$
MM em. + M*F rec.	0.1 T	0.1 T	3 T	10^5	0.1 kW	10^{-3}	$3 \times 10^{-10} \text{ GeV}^{-1}$
MF em. + M*M rec.	0.01 T	3 T	0.1 T	10^{10}	100 kW	10^{-3}	$9 \times 10^{-11} \text{ GeV}^{-1}$

**Fig. 1.** Two specific types of the experimental configuration consisting of two cylindrical cavities with (left panel) coaxial or (right panel) parallel orientation and screened by axion-penetrable wall. Wavy and solid lines represent electromagnetic field (cavity mode or magnetic field) and ALPs respectively

ALPs from the emitter to the receiver for all aforementioned designs (i-iv) and discuss their optimal configuration, either coaxial or parallel (see, e.g., Fig. 1 for detail). In addition, we investigate $g_{a\gamma\gamma}$ sensitivity dependence on the radius-to-length ratio of production cylindrical cavity.

We summarize our results by presenting important parameters for each setup in Table 1. We concluded that the MF emitter + M*F receiver and the MM emitter + M*M receiver setups can achieve the similar top sensitivity $g_{a\gamma\gamma} \lesssim (3-5) \times 10^{-11} \text{ GeV}^{-1}$ at $m_a \lesssim \omega_a/2$. In particular, it turns out that the larger electromagnetic field combination and the geometrical formfactor of RF cavities compensate its smaller quality factor. Moreover, we find that the best relative location of the cavities is coaxial with the ratio of $R/L \simeq 1.6$.

The MF emitter + M*F receiver setup is a modification of the CROWS experiment [12] that implies larger volume of the cavities $V_{\text{em}} \simeq V_{\text{rec}} \simeq 1 \text{ m}^3$, lower temperature, and narrower bandwidth of the signal, $\Delta\nu \simeq 1/t$. However, there is a disadvantage of this setup that implies the relatively large emitter power $P_{\text{em}} \sim 100 \text{ kW}$.

The advantage of the MM emitter + M*M receiver setup is that its emitter power is 4 orders of magnitude smaller than the previous one. However, in this case the main technical challenges would be related to the signal mode filtering from the pump mode and fine tuning of cavity sizes.

Given the benchmark parameters, the last two setups, MM emitter + M*F receiver and MF emitter +

+ M*M receiver, has the weakest sensitivity, see Table 1. Moreover, the typical bounds $g_{a\gamma\gamma} \lesssim \mathcal{O}(10^{-10}) \text{ GeV}^{-1}$ would be ruled out by the CAST. Also, there is a disadvantage of these proposals. In particular, the condition $\omega_1 + \omega_2 = \omega_s$ implies the specific type of the emitter modes, the latter is linked to the sizes of the cavity. Moreover, the modification of the pump modes would require the changing of the receiver geometry. The disadvantages of the MF emitter + M*M receiver include also technical difficulties of the first two setups.

This is an excerpt of the article “Light-shining-through-wall cavity setups for probing ALPs”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023600957

1. R. D. Peccei and H. R. Quinn, Phys. Rev. Lett. **38**, 1440 (1977).
2. P. Svrcek and E. Witten, JHEP **06**, 051 (2006), hep-th/0605206.
3. J. Preskill, M. B. Wise, and F. Wilczek, Phys. Lett. B **120**, 127 (1983).
4. L. F. Abbott and P. Sikivie, Phys. Lett. B **120**, 133 (1983).
5. M. Dine and W. Fischler, Phys. Lett. B **120**, 137 (1983).
6. V. Anastassopoulos, S. Aune, K. Barth et al. (CAST collaboration), Nature Phys. **13**, 584 (2017); 1705.02290.
7. I. G. Irastorza and J. Redondo, Prog. Part. Nucl. Phys. **102**, 89 (2018); 1801.08127.
8. P. Sikivie, Phys. Rev. Lett. **51**, 1415 (1983), Erratum: Phys. Rev. Lett. **52**, 695 (1984).
9. A. A. Anselm, Yad. Fiz. **42**, 1480 (1985).
10. F. Hoogeveen, Phys. Lett. B **288**, 195 (1992).
11. K. Ehret, M. Frede, S. Ghazaryan et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **689**, 149 (2010); 1004.1313.
12. M. Betz, F. Caspers, M. Gasior, M. Thumm, and S. W. Rieger, Phys. Rev. D **88**, 075014 (2013), 1310.8098.
13. M. Ortiz, J. Gleason, H. Grote et al. (Collaboration), Phys. Dark Univ. **35**, 100968 (2022); 2009.14294.
14. A. Berlin, S. Belomestnykh, D. Blas et al. (Collaboration), (2022), 2203.12714.
15. C. Gao and R. Harnik, JHEP **07**, 053 (2021), 2011.01350.
16. D. Salnikov, P. Satunin, D. V. Kirpichnikov, and M. Fitkevich, JHEP **03**, 143 (2021); 2011.12871.

Глюонная аномалия и нарушение правила Цвейга

А. А. Осипов¹⁾

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 21 марта 2023 г.

После переработки 5 мая 2023 г.

Принята к публикации 5 мая 2023 г.

Хорошо известно, что глюонная аномалия сообщает массу $U(1)$ голдстоуновскому бозону. Здесь мы обращаем внимание на другую ее особенность, которая проявляется в свойствах псевдоголдстоуновских состояний: глюонная аномалия в следующем порядке $1/N_c$ разложения индуцирует взаимодействия, нарушающие правило Цвейга. Необходимым условием для этого является явное нарушение киральной симметрии массами легких кварков. Одно из физических следствий – вывод, что η - η' смешивание не влияет на амплитуду $\eta \rightarrow 3\pi$. Другое – подавление первой $1/N_c$ -поправки к углу η - η' смешивания. Подробно обсуждается механизм такого подавления. Наши выводы основываются на $1/N_c$ разложении и эффективном мезонном лагранжиане модели Намбу–Иона–Лазинио. Проводится сравнение с результатами $1/N_c$ киральной теории возмущений.

DOI: 10.31857/S1234567823120042, EDN: evdgis

В физических свойствах псевдоскалярного нонета мезонов η' , η , K , π удивительным образом переплетены эффекты спонтанного, явного и аномального нарушения киральной $U(3)_L \times U(3)_R$ симметрии. Спонтанное нарушение симметрии сопровождается появлением кваркового конденсата и, как следствие, возбуждением безмассовых голдстоуновских мод. Благодаря явному нарушению симметрии ненулевыми массами легких u , d и s кварков, голдстоуновские моды приобретают массу. Глюонная аномалия нарушает аксиальную $U(1)_A$ симметрию, в результате в теории отсутствует сохраняющийся $U(1)$ заряд, а также легкая изоскалярная частица L с квадратом массы $m_L^2 \leq 3m_\pi^2$ [1]. Для последовательной теоретической картины не менее важно понять каким образом указанные выше процессы взаимосвязаны между собой и как эта взаимосвязь отражается в наблюдаемых свойствах псевдоскаляров.

Известно, что качественно верная картина адронов возникает в квантовой хромодинамике (КХД) в приближении больших значений N_c , где N_c – число цветовых степеней свободы кварк-глюонной системы [2, 3]. Один из способов продвинуться в количественном описании – сформулировать правила N_c -счета внутри конкретной эффективной теории. Это позволяет перейти от рассмотрения предела больших N_c к разложению по степеням $1/N_c$ и, как следствие, классифицировать вершины мезонного лагранжиана по степени их важности, а значит, и отведенной им ро-

ли в киральной динамике адронов. Примером такого подхода служит $1/N_c$ киральная теория возмущений ($1/N_c\chi$ ТВ) [4–7], где при построении эффективного мезонного лагранжиана предполагается, что массы легких (токовых) кварков m_i ($i = u, d, s$), а также квадраты импульсов имеют порядок $1/N_c$. Первые два шага такого разложения $\mathcal{L} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)}$ имеют порядок $(1/N_c)^0$ и $(1/N_c)^1$ соответственно и не содержат киральных логарифмов, которые возникают только на следующем шаге разложения лагранжиана псевдоголдстоуновских полей.

Недавно было замечено [8–11], что аналогичное разложение может быть осуществлено в рамках кварковой версии модели Намбу–Иона–Лазинио (НИЛ) [12, 13]. Одной из важных особенностей модели является механизм генерации тяжелых (составляющих) масс кварков M_i ($i = u, d, s$), что позволяет использовать ее в качестве эффективной теории для КХД при низких энергиях. Вершины эффективного мезонного лагранжиана получаются в результате вычисления однопетлевых кварковых диаграмм [14, 15]. Поскольку массы составляющих кварков велики, при вычислении кварковой петли можно ограничиться первыми членами разложения по степеням $1/M_i^2$, что удобнее всего осуществить, воспользовавшись методом собственного времени Фока–Швингера. В случае неравных масс кварков $M_u \neq M_d \neq M_s$, происходит перестройка ряда по степеням собственного времени, что связано с использованием ряда Вольтерры. Последний позволяет последовательно выделить эффекты явного наруше-

¹⁾e-mail: aaosipov@jinr.ru

ния киральной симметрии при разложении кварковой петли [16–18]. Таким образом, модель НИЛ позволяет описать взаимосвязь эффектов спонтанного и явного нарушения киральной симметрии важных при построении эффективного мезонного лагранжиана. Такой подход, в частности, автоматически, т.е. без каких-либо дополнительных киральных разложений, позволяет получить результат Гелл–Манна–Оакса–Ренера, утверждающий, что квадрат массы псевдоскалярной частицы пропорционален величине кваркового конденсата и сумме токовых масс кварков (см. [8]).

В данной заметке я хочу обратить внимание на новое интересное проявление аномального нарушения $U(1)_A$ симметрии в спектре нейтральных псевдоскаляров, суть которого заключается в следующем. В теории с явно нарушенной киральной симметрией глюонная аномалия индуцирует вклады, нарушающие правило Окубо–Цвейга–Иизуки (ОЦИ). Как будет показано ниже, это приводит к частичному подавлению эффекта явного нарушения киральной симметрии в амплитуде $\eta \rightarrow 3\pi$, а также заметному уменьшению $1/N_c$ -поправки к углу η – η' смешивания.

В качестве отправной точки рассмотрим свободный лагранжиан нейтральных членов псевдоскалярного нонета, который возникает из вычислений кварковых однопетлевых диаграмм, и дополнительно учтем вклад аксиальной $U(1)_A$ аномалии

$$\mathcal{L}_{\phi^2} = \sum_{i=u,d,s} \left[\frac{\kappa_{Aii}}{16G_V} (\partial_\mu \phi_i)^2 - \frac{M_i m_i}{4G_S} \phi_i^2 \right] - \frac{\lambda_U}{2} \phi_0^2. \quad (1)$$

Здесь ϕ_i – голые полевые функции, являющиеся диагональными компонентами нелинейного псевдоскалярного поля $U = e^{i\phi}$, $\phi = \sum_r \phi_r \lambda_r$, принадлежащего $u(3)$ алгебре Ли, с базисом λ_r , $r = 0, 1, 2, \dots, 8$, где $\lambda_0 = \sqrt{2/3}$, а остальные семь составляют стандартный набор $SU(3)$ матриц Гелл–Манна. В дальнейшем, говоря о нейтральных компонентах, мы используем либо октет-синглетный базис ($\lambda_0, \lambda_8, \lambda_3$), либо флейворный ($\lambda_u, \lambda_d, \lambda_s$)

$$\phi = \sum_{a=0,8,3} \phi_a \lambda_a = \sum_{i=u,d,s} \phi_i \lambda_i. \quad (2)$$

Связь между ними имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda_u &= \frac{\lambda_3}{2} + \frac{\sqrt{2}\lambda_0 + \lambda_8}{2\sqrt{3}} = \text{diag}(1, 0, 0), \\ \lambda_d &= -\frac{\lambda_3}{2} + \frac{\sqrt{2}\lambda_0 + \lambda_8}{2\sqrt{3}} = \text{diag}(0, 1, 0), \\ \lambda_s &= \frac{\lambda_0 - \sqrt{2}\lambda_8}{\sqrt{6}} = \text{diag}(0, 0, 1). \end{aligned} \quad (3)$$

Константы G_S и G_V характеризуют силу $U(3)_L \times U(3)_R$ кирально симметричных четырехкварковых взаимодействий спина 0 и 1 соответственно. Они, в отличие от поля (2), размерны $[G_{S,V}] = M^{-2}$, и при больших значениях N_c убывают, как $\mathcal{O}(1/N_c)$.

Размерный коэффициент $\lambda_U = \mathcal{O}(N_c^0)$ в лагранжиане (1) является топологической пронцаемостью чисто глюонной теории $[\lambda_U] = M^4$. Эта часть $\mathcal{L}_{\phi^2}$ следует из выражения, возникающего в результате учета квантовых флуктуаций плотности топологического заряда $Q(x) = \frac{g^2}{32\pi^2} F_{\mu\nu}^a \tilde{F}_{\mu\nu}^a$, которые описываются лагранжианом

$$\mathcal{L}_Q^{(0)} = \frac{3}{\lambda_U} Q^2(x) + \frac{i}{2} Q(x) \text{tr}(\ln U - \ln U^\dagger). \quad (4)$$

Его причастность к решению $U(1)$ проблемы подробно исследовалась в работах [19–22]. В частности, воспользовавшись уравнением движения поля $Q(x)$ можно исключить плотность топологического заряда в (4) и придти к лагранжиану

$$\mathcal{L}_Q^{(0)} \rightarrow \mathcal{L}_{U(1)} = \frac{\lambda_U}{48} [\text{tr}(\ln U - \ln U^\dagger)]^2, \quad (5)$$

который явно нарушает $U(1)_A$ симметрию и после подстановки $U = e^{i\phi}$ приводит к последнему слагаемому в (1). В модели НИЛ лагранжиан (5) использовался, например, в работе [14].

Поскольку непротиворечивое решение $U(1)$ проблемы достигается в рамках $1/N_c$ разложения КХД, представляется разумным взглянуть на эффективный мезонный лагранжиан (1), с той же точки зрения. Это возможно, если мы воспользуемся правилами счета, предложенными в работах [4, 5]. Действительно, малые параметры низкоэнергетического лагранжиана (1) удобно объединить в один параметр δ , положив $1/N_c \sim \delta$, $\partial^2 \sim \delta$ и $m_i \sim \delta$. Мы видим, что все три члена в (1) имеют одинаковый порядок по δ (если $\kappa_{Aii}, M_i, \phi_r \sim \delta^0$) и отвечают лидирующему вкладу $\sim \delta^0$.

В этом случае модель НИЛ позволяет продвигаться дальше и извлечь из (1) $1/N_c$ -поправку к лидирующему вкладу. Для этого достаточно воспользоваться уравнением щели, которое связывает массы легких токовых кварков m_i с массами тяжелых составляющих кварков M_i . Поскольку решением уравнения щели в данном случае будет ряд Тейлора по степеням δ , вычисление первой поправки сведется к определению линейного по m_i члена в разложении $M_i = M_0 + am_i + \mathcal{O}(m_i^2)$, где $M_0 = \mathcal{O}(\delta^0)$ – масса конститuentного кварка в пределе $N_c \rightarrow \infty$, и последующей подстановки данного результата в (1).

Подчеркнем существенное отличие данного подхода от стандартного. При стандартном рассмотрении предполагается, что $m_i \sim \delta^0$. Решением уравнения щели будет вся функция $M_i(m_i)$, а вычисление $1/N_c$ -поправки потребует рассмотрения киральных логарифмов, что подразумевает существенную модификацию модели НИЛ, которая, как было отмечено в [23], может оказаться теоретически необоснованной процедурой. Однако, если $m_i = \mathcal{O}(1/N_c)$, то вклад киральных логарифмов начинается только с порядка $(m_i/N_c) \ln m_i \sim \delta^2$, т.е. с третьего шага разложения по степеням δ . Именно с этим обстоятельством связана возможность гарантированного использования эффективного лагранжиана $1/N_c$ -модели НИЛ для оценки масс и других характеристик псевдоскалярного нонета мезонов в приближении $\mathcal{O}(\delta)$. И именно в этом случае ряд Вольтерры играет основную роль в описании эффектов явного нарушения киральной симметрии.

Диагональные элементы матрицы κ_A в (1) имеют вид

$$(\kappa_A)_{ii}^{-1} = 1 + \frac{\pi^2}{N_c G_V M_i^2 J_1(M_i)}, \quad (6)$$

где $J_1(M)$ – логарифмически расходящаяся часть однопетлевой кварковой диаграммы

$$J_1(M) = \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{M^2} \right) - \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + M^2}. \quad (7)$$

Здесь используется регуляризация через обрезание интегралов по собственному времени. Ковариантный параметр обрезания Λ входит также и в уравнение щели, и поэтому является характерным масштабом спонтанного нарушения киральной симметрии. Считается, что $\Lambda = 4\pi f_\pi \simeq 1.1$ ГэВ [24]. Более подробную информацию о деталях получения приведенных выше выражений можно найти в работах [9, 11, 18].

Заметим, что если воспользоваться правилами счета, принятыми в $1/N_c \chi$ ТВ, лидирующий порядок членов лагранжиана (1) равен $(1/N_c)^0$. В этом порядке наш лагранжиан полностью совпадает с лагранжианом $\mathcal{L}^{(0)}$ в $1/N_c \chi$ ТВ, низкоэнергетические константы которого могут быть выражены через параметры модели НИЛ. Второе замечание касается структуры выражения в квадратных скобках. Оно имеет диагональную форму в кварк-флейворном базисе и при отсутствии $U(1)_A$ аномалии нейтральные поля были бы чистыми флейворными состояниями. Присутствие аномалии кардинально меняет ситуацию, а именно, требует диагонализации массовой части лагранжиана, и, как следствие, перехода к новым полевым функциям, которые мы будем ассоциировать с октет-синглетным базисом.

Рассмотрим кинетическую часть лагранжиана (1), которая после переопределения переменных

$$\phi_i = f_i^{-1} \phi_i^R \quad (8)$$

примет канонический вид. Новые переменные отмечены индексом R и, как легко видеть, имеют размерность массы, которую константам f_i сообщает размерный параметр G_V

$$f_i = \sqrt{\frac{\kappa_{Aii}}{4G_V}} = \mathcal{O}(\sqrt{N_c}). \quad (9)$$

В результате получаем

$$\mathcal{L}_{\text{kin}} = \frac{1}{4} \sum_{i=u,d,s} (\partial_\mu \phi_i^R)^2 = \frac{1}{2} \sum_{a=0,3,8} (\partial_\mu \phi_a^R)^2. \quad (10)$$

где связь компонент $\phi_{u,d,s}$ с компонентами $\phi_{0,3,8}$, так же как и связь между компонентами $\phi_{u,d,s}^R$ и $\phi_{0,3,8}^R$, легко определяется из формулы (2).

Особенностью перехода от голых полей ϕ_a к полям ϕ_a^R , как несложно выяснить, является возникновение примеси, а именно, голые поля представляют суперпозицию из новых полей, и наоборот

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \frac{\phi_0^R}{f_0} + \left(\frac{1}{f_u} - \frac{1}{f_d} \right) \frac{\phi_3^R}{\sqrt{6}} + \left(\frac{1}{f_u} + \frac{1}{f_d} - \frac{2}{f_s} \right) \frac{\phi_8^R}{3\sqrt{2}}, \\ \phi_8 &= \frac{\phi_8^R}{f_8} + \left(\frac{1}{f_u} - \frac{1}{f_d} \right) \frac{\phi_3^R}{2\sqrt{3}} + \left(\frac{1}{f_u} + \frac{1}{f_d} - \frac{2}{f_s} \right) \frac{\phi_0^R}{3\sqrt{2}}, \\ \phi_3 &= \frac{\phi_3^R}{f_3} + \left(\frac{1}{f_u} - \frac{1}{f_d} \right) \frac{\phi_8^R + \sqrt{2}\phi_0^R}{2\sqrt{3}}, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} f_0^{-1} &= \frac{1}{3} (f_u^{-1} + f_d^{-1} + f_s^{-1}), \\ f_8^{-1} &= \frac{1}{6} (f_u^{-1} + f_d^{-1} + 4f_s^{-1}), \\ f_3^{-1} &= \frac{1}{2} (f_u^{-1} + f_d^{-1}). \end{aligned} \quad (12)$$

Очевидно, что примешивание происходит только за счет явного нарушения киральной симметрии, как изоспиновой, так и $SU(3)_f$ флейворной. Отсюда следует, что при переходе к новым полевым переменным аномальная часть лагранжиана (1), помимо лидирующего вклада $\sim (\phi_0^R)^2$, даст вклады порядка $1/N_c$, которые типичны для взаимодействий, нарушающих правило ОЦИ.

Действительно, в этом порядке $1/N_c$ разложения присутствует ОЦИ, нарушающее взаимодействие [22]

$$\mathcal{L}_Q^{(1)} = i\sqrt{6}Q(x) \frac{\lambda_Z}{\lambda_U} \text{tr}[\chi (U - U^\dagger)], \quad (13)$$

которое после подстановки решения уравнения движения для поля $Q(x)$, найденное из (4), примет следующий вид [25]

$$\mathcal{L}_Q^{(1)} \rightarrow \mathcal{L}_{OZI} = \frac{i\lambda_Z}{\sqrt{6}} \text{tr}(\phi) \text{tr}[\chi (U - U^\dagger)], \quad (14)$$

где $\lambda_Z = \mathcal{O}(N_c^0)$ – размерная константа $[\lambda_Z] = M^2$, а матрица $\chi = 2Bm$ явно нарушает $SU(3) \times SU(3)$ симметрию и имеет вид

$$\chi = \frac{4G_V}{G_S} \text{diag} \left(\frac{M_u m_u}{\kappa_{Auu}}, \frac{M_d m_d}{\kappa_{Add}}, \frac{M_s m_s}{\kappa_{Ass}} \right). \quad (15)$$

В этом случае лидирующий член разложения по массам легких кварков совпадает с известным выражением киральной теории возмущений $\chi = 2B_0 m + \mathcal{O}(m^2)$. Важно, что взаимодействие (14) не ассоциируется с глюонной аномалией, т.е. имеет самостоятельное значение. Его квадратичная часть ведет к смешиванию синглетной компоненты с диагональными членами октета

$$\mathcal{L}_{OZI} \rightarrow -8\lambda_Z \frac{G_V}{G_S} \phi_0 \sum_{i=u,d,s} \frac{M_i m_i}{(\kappa_A)_{ii}} \phi_i, \quad (16)$$

и поэтому будет интерферировать с соответствующим вкладом глюонной аномалии.

Чтобы установить, как такая интерференция отражается на спектре псевдоголдстоуновских состояний, обратимся к массовой матрице

$$\mathcal{L}_m = -\frac{1}{2} \sum_{a=0,8,3} \phi_a^R \mathcal{M}_{ab}^2 \phi_b^R. \quad (17)$$

Используя вышеприведенные формулы, представим результат в виде суммы лидирующего вклада и первой $1/N_c$ поправки к нему $\mathcal{L}_m = \mathcal{L}_m^{(0)} + \mathcal{L}_m^{(1)}$

$$\mathcal{M}_{ab}^2 = \mu_{ab}^2 + \Delta\mu_{ab}^2 + \mathcal{O}(1/N_c^3). \quad (18)$$

Обратим внимание, что поля $\phi_a^R = \mathcal{O}(\sqrt{N_c})$. Это следует из формул (8) и (9). Поэтому разложение (18), содержащее члены порядка $1/N_c^2$, не превышает точности проводимых здесь вычислений.

Основной вклад порядка $1/N_c$ имеет вид

$$\begin{aligned} \mu_{00}^2 &= \frac{2}{3} B_0 (2\hat{m} + m_s) + \lambda_\eta^2, \\ \mu_{88}^2 &= \frac{2}{3} B_0 (\hat{m} + 2m_s), \\ \mu_{33}^2 &= 2B_0 \hat{m}, \\ \mu_{08}^2 &= -2\frac{\sqrt{2}}{3} B_0 (m_s - \hat{m}), \\ \mu_{03}^2 &= -\sqrt{\frac{2}{3}} B_0 (m_d - m_u), \\ \mu_{38}^2 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} B_0 (m_d - m_u), \end{aligned} \quad (19)$$

где мы ввели обозначение $\lambda_\eta^2 = \lambda_U/F^2$. Величина константы слабого распада пиона в киральном пределе равна $F = \sqrt{\kappa_{A0}/(4G_V)}$, здесь κ_{A0} – киральный предел для константы (6). В формуле также используется стандартное обозначение для среднего значения масс нестранных кварков $\hat{m} = (m_u + m_d)/2$. Константа

$$B_0 = \frac{2G_V M_0}{G_S \kappa_{A0}} = \frac{M_0}{2G_S F^2} = -\frac{\langle \bar{q}q \rangle_0}{F^2} \quad (20)$$

выражается через массу составляющего кварка M_0 в киральном пределе. Последняя определяется из разложения в ряд по $1/N_c$ нетривиального решения уравнения щели $M_i(m_i)$, где нам требуются только два первых члена $M_i(m_i) = M_0 + am_i + \mathcal{O}(1/N_c^2)$. Коэффициент $a = \pi^2/(N_c G_S M_0^2 J_1(M_0))$ [10]. Величина кваркового конденсата $\langle \bar{q}q \rangle_0$ также отвечает случаю безмассовых токовых кварков. Формулы (19) хорошо известны. В частности, их диагонализация приводит к массе η -мезона $m_\eta = 494$ МэВ, которая значительно ниже феноменологического значения $m_\eta = 548$ МэВ. Поэтому необходимо сделать следующую шаг в разложении по $1/N_c$.

Первая поправка к результату (19) имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\mu_{00}^2 &= \frac{2B_0}{3} \left[(2\hat{m}^2 + m_s^2) \frac{\delta_M}{M_0} - 2\Delta_N (2\hat{m} + m_s) \right], \\ \Delta\mu_{08}^2 &= \frac{2\sqrt{2}}{3} B_0 (m_s - \hat{m}) \left[\Delta_N - (m_s + \hat{m}) \frac{\delta_M}{M_0} \right], \\ \Delta\mu_{88}^2 &= \frac{2B_0}{3M_0} (\hat{m}^2 + 2m_s^2) \delta_M, \\ \Delta\mu_{33}^2 &= \frac{2B_0}{M_0} \hat{m}^2 \delta_M, \\ \Delta\mu_{03}^2 &= \sqrt{\frac{2}{3}} B_0 (m_d - m_u) \left(\Delta_N - 2\hat{m} \frac{\delta_M}{M_0} \right), \\ \Delta\mu_{38}^2 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{B_0}{M_0} (m_d^2 - m_u^2) \delta_M, \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\Delta_N \equiv \lambda_U G_S \frac{a - \delta_M}{2M_0^2} - 2\sqrt{6} \frac{\lambda_Z}{F^2}, \quad (22)$$

и

$$a - \delta_M = 2a(1 - \kappa_{A0}) \left[1 - \frac{\Lambda^4 J_1(M_0)^{-1}}{(\Lambda^2 + M_0^2)^2} \right]. \quad (23)$$

Поясним происхождение вкладов в формуле (21). Члены, выживающие в пределе $\Delta_N = 0$, происходят от разложения в ряд по степеням $1/N_c$ массовой части лагранжиана (1), где предварительно необходимо перейти к полевым функциям ϕ_a^R . Этот результат с точностью до общего множителя совпадает с ре-

зультатом аналогичных вычислений в $1/N_c\chi\text{TB}$ [26]. Связь между множителями имеет вид

$$\frac{\delta_M}{M_0} \leftrightarrow 16 \frac{B_0}{F^2} (2L_8 - L_5). \quad (24)$$

Поправки, индуцированные аксиальной аномалией, в формуле (21) пропорциональны λ_U и собраны в Δ_N . Вклад в $\Delta\mu_{00}^2$ связан с учетом $1/N_c$ поправки в константу f_0 . Другие два вклада в $\Delta\mu_{08}^2$ и $\Delta\mu_{03}^2$ – эффект присутствия октетных компонент ϕ_8^R и ϕ_3^R в голом синглетном поле ϕ_0 , что описывается формулой (11). Таким образом аномалия, благодаря явному нарушению киральной симметрии, приводит к дополнительному вкладу в коэффициент Δ_N , который в противном случае определялся бы только взаимодействиями, нарушающими правило ОЦИ. Последние, как мы уже отмечали, не связаны с аксиальной аномалией. Сравнивая полученные здесь выражения $\Delta\mu_{08}^2$, $\Delta\mu_{03}^2$ с аналогичными формулами в [26], можно установить соответствие

$$\Delta_N \leftrightarrow -\rho/2 = \Lambda_1/2 - \Lambda_2 + 4L_5M_0^2/F_0^2, \quad (25)$$

где в правой части сохранены обозначения работы [26]. Не следует путать используемое там обозначение M_0 для массы синглета (которая у нас обозначена, как λ_η) с массой составляющего кварка в киральном пределе, используемой здесь. В модели НИЛ константа $\Lambda_1 = 0$. Другой параметр Λ_2 совпадает с используемой здесь величиной $2\sqrt{6}\lambda_Z/F^2$. Третьему слагаемому в (25) в точности соответствует наше выражение

$$\frac{4L_5M_0^2}{F_0^2} \leftrightarrow \frac{4\lambda_\eta^2}{F^2} \frac{(a - \delta_M)F^2}{16B_0M_0} = \lambda_U G_S \frac{a - \delta_M}{2M_0^2}. \quad (26)$$

Отсюда следует, что эффект, обсуждаемый здесь, имеет место и в $1/N_c\chi\text{TB}$, т.е. генерация посредством аксиальной аномалии вкладов, нарушающих правило ОЦИ, – общее свойство любой эффективной теории с явно нарушенной киральной симметрией.

Чтобы сделать количественные оценки, необходимо диагонализировать массовую матрицу $\mathcal{M}_{ab}^2$. Смешивание ϕ_3^R с полями ϕ_8^R и ϕ_0^R происходит за счет нарушения изоспиновой симметрии. В первом порядке по разности масс $m_d - m_u$ оно устраняется поворотом на малые углы ϵ и ϵ' соответственно. Смешивание компонент ϕ_0^R и ϕ_8^R – результат нарушения $SU(3)_f$ симметрии. Для его устранения необходимо осуществить поворот на угол θ . С точностью до первого порядка по нарушению изотопической симметрии преобразование нейтральных компонент к физическим состояниям π^0 , η и η' имеет вид

$$\begin{aligned} \phi_3^R &= \pi^0 - \epsilon\eta - \epsilon'\eta', \\ \phi_8^R &= (\epsilon \cos \theta + \epsilon' \sin \theta)\pi^0 + \cos \theta \eta + \sin \theta \eta', \\ \phi_0^R &= (\epsilon' \cos \theta - \epsilon \sin \theta)\pi^0 - \sin \theta \eta + \cos \theta \eta'. \end{aligned} \quad (27)$$

Поскольку массовая матрица (18) представляет собой сумму двух вкладов, отвечающих лидирующему приближению и первой поправки к нему, углы ортогонального преобразования (27) следует искать в виде такого же разложения: $\theta = \theta_0 + \Delta\theta$, $\epsilon = \epsilon_0 + \Delta\epsilon$, и $\epsilon' = \epsilon'_0 + \Delta\epsilon'$. Здесь углы θ_0 , ϵ_0 и ϵ'_0 имеют порядок N_c^0 . Они отвечают за диагонализацию основного вклада. $1/N_c$ поправки к ним $\Delta\theta$, $\Delta\epsilon$ и $\Delta\epsilon'$ обеспечивают диагональность массовой матрицы, в которой учтены и первые поправки. Очевидно, что и собственные значения массовой матрицы $m_{\eta'}^2$, m_η^2 и $m_{\pi^0}^2$, которые мы получим в результате ортогонального поворота (27), имеют аналогичный вид: $m_\eta^2 = \mu_\eta^2 + \Delta\mu_\eta^2$, $m_{\eta'}^2 = \mu_{\eta'}^2 + \Delta\mu_{\eta'}^2$, и $m_{\pi^0}^2 = \mu_{33}^2 + \Delta\mu_{33}^2$, где

$$\begin{aligned} \mu_{\eta,\eta'}^2 &= \frac{1}{2} \left[\mu_{00}^2 + \mu_{88}^2 \mp \sqrt{(\mu_{00}^2 - \mu_{88}^2)^2 + 4\mu_{08}^4} \right], \\ \Delta\mu_{\eta,\eta'}^2 &= \frac{1}{2} \left(\Delta\mu_{00}^2 + \Delta\mu_{88}^2 \mp \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{(\mu_{00}^2 - \mu_{88}^2)(\Delta\mu_{00}^2 - \Delta\mu_{88}^2) + 4\mu_{08}^2\Delta\mu_{08}^2}{\sqrt{(\mu_{00}^2 - \mu_{88}^2)^2 + 4\mu_{08}^4}} \right). \end{aligned} \quad (28)$$

Мы не будем останавливаться на всех деталях фиксации параметров модели. Это было сделано в работах [10, 11], исходя из спектра заряженных псевдоскаляров. Результаты собраны в двух приведенных здесь табл. 1, 2. Отметим лишь, что рассмотрение нейтральных псевдоскаляров потребовало привлечения двух новых констант λ_U и λ_Z , величины которых мы определяем исходя из экспериментальных значений масс η и η' мезонов. В результате находим: $\lambda_U = (285 \text{ МэВ})^4$ и $\lambda_Z = (27.7 \text{ МэВ})^2$. Теперь убедимся, что параметр Δ_N , имеющий порядок $1/N_c$, остается малым и при конечном значении $N_c = 3$. Его величина определяется разностью (22), что численно равно $\Delta_N = 0.82 - 0.46 = 0.36$. Это разумная оценка. Заметим, что в $1/N_c\chi\text{TB}$ $\Delta_N = 1$, т.е. наблюдается существенная рассогласованность $1/N_c$ -разложения.

Обсудим роль вкладов, связанных с глюонной аномалией, при расчете $1/N_c$ поправок к массам нейтральных псевдоскаляров. Начнем с величины $1/N_c$ поправки к углу η - η' смешивания $\Delta\theta$. Она была вычислена в работе [26] в $1/N_c\chi\text{TB}$. Оказалось, что результат основного приближения $\theta_0 = -18.6^\circ$, после учета $1/N_c$ поправки уменьшается до величины $\theta_0 + \Delta\theta = -10^\circ$. Такое значительное снижение ставит под сомнение предсказательную силу $1/N_c$ разложения.

Таблица 1. Для фиксации шести параметров модели Λ , G_S , G_V , m_u , m_d , и m_s используются массы π^0 , $\pi^\pm$, K^0 , $K^\pm$ мезонов, величина константы распада пиона f_π и обрезание Λ . Электромагнитные поправки к массам заряженных частиц учитывают отклонения от теоремы Дашена, возникающее в следующем порядке $1/N_c$ разложения. С этой целью мы дополнительно использовали экспериментальное значение константы f_K , а также феноменологические данные по ширине распада $\eta \rightarrow 3\pi$. Все единицы, за исключением $[\Lambda] = \text{ГэВ}$, $[G_{S,V}] = \text{ГэВ}^{-2}$ и безразмерных констант a и δ_M , приведены в МэВ

Λ	G_S	G_V	m_u	m_d	m_s	M_0	$-\langle \bar{q}q \rangle_0^{1/3}$	M_u	M_d	M_s	F	f_π	f_K	δ_M	a
1.1	6.6	7.4	2.6	4.6	84	274	275	283	290	567	90.5	92.2	111	0.67	3.50

Таблица 2. В первой строке, вариант (a), приводится результат диагонализации лидирующего вклада углами θ_0 , ϵ_0 and ϵ'_0 . Кварковые массы приведены в МэВ, θ в градусах, а углы ϵ и ϵ' – в радианах. Величина константы λ_η^2 (в ГэВ^2) определена по экспериментальному значению массы η' мезона. Во второй строке, вариант (b), учтены $1/N_c$ поправки (в том числе и при извлечении значений легких масс кварков). Параметры λ_η^2 и Δ_N , фиксируются по феноменологическим значениям масс η и η' мезонов

	m_u	m_d	m_s	λ_η^2	Δ_N	θ	θ_0	$\Delta\theta$	ϵ	ϵ_0	$\Delta\epsilon$	ϵ'	ϵ'_0	$\Delta\epsilon'$
(a)	2.6	4.6	93	0.671	–	–	-19.7°	–	–	0.0187	–	–	0.0033	–
(b)	2.6	4.6	84	0.805	0.36	-15.76°	-14.97°	-0.79°	0.0114	0.0177	-0.0063	0.0021	0.0033	-0.0012

Как видно из табл. 2, угол $\theta_0 = -15.0^\circ$, получаемый в модели НИЛ, близок к указанной выше оценке [26]. С другой стороны, $1/N_c$ -поправка, полученная нами, мала $\Delta\theta = -0.8^\circ$. Ее небольшая величина – результат вклада аксиальной аномалии. Действительно, из наших вычислений следует, что

$$\begin{aligned} \Delta\theta &= \frac{1}{4} \sin 4\theta_0 \left[(m_s + \hat{m}) \frac{\delta_M}{M_0} \left(1 - \frac{\text{tg } 2\theta_0}{2\sqrt{2}} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \Delta_N \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_s + 2\hat{m}}{m_s - \hat{m}} \text{tg } 2\theta_0 \right) \right] = \\ &= -0.056 + 0.042 = -0.014. \end{aligned} \quad (29)$$

Таким образом, вклад второго слагаемого $\sim \Delta_N$ (где доминирует вклад, связанный с аксиальной аномалией) существенно снижает величину поправки.

В качестве второго примера рассмотрим известную проблему [5], которая возникает при вычислении углов ϵ и ϵ' в лидирующем порядке теории. Сразу заметим, что на этом шаге модель НИЛ приводит к тем же формулам, которые были получены в $1/N_c \chi\text{TB}$ [5]:

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= \bar{\epsilon}_0 \cos \theta_0 \frac{\cos \theta_0 - \sqrt{2} \sin \theta_0}{\cos \theta_0 + \sin \theta_0 / \sqrt{2}}, \\ \epsilon'_0 &= \bar{\epsilon}_0 \sin \theta_0 \frac{\sin \theta_0 + \sqrt{2} \cos \theta_0}{\sin \theta_0 - \cos \theta_0 / \sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (30)$$

где угол π^0 - η смешивания $\bar{\epsilon}_0$ был вычислен в работе Гросса, Треймана и Вильчека [27] в пренебрежении η - η' смешиванием

$$\bar{\epsilon}_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{m_d - m_u}{m_s - \hat{m}} = 0.011. \quad (31)$$

Учет η - η' смешивания значительно увеличивает величину угла ϵ_0 по сравнению с $\bar{\epsilon}_0$. Оценка $\epsilon_0 = 0.018$,

которую дают наши вычисления, согласуется с результатом $\epsilon_0 \simeq 2\bar{\epsilon}_0$, полученным Лойтвилером при величине угла смешивания $\theta_0 \simeq -22^\circ$ [5], а также с результатом $\epsilon_0 = 0.017 \pm 0.002$ [28]. Все эти оценки сделаны при одинаковых предположениях: использование теоремы Дашена и учет η - η' смешивания. Такая большая величина ϵ_0 делает теоретическое значение ширины распада $\eta \rightarrow 3\pi$ неприемлемо большим. Этот эффект анализировался в работе [5] в рамках лидирующего приближения $1/N_c \chi\text{TB}$, где, в частности, было высказано предположение, что проблема может быть решена за счет учета $1/N_c$ поправки. Покажем, что это действительно имеет место, причем главную роль здесь опять играет аксиальная аномалия.

Вклад в угол $\Delta\epsilon$ формируется за счет трех слагаемых $\Delta\epsilon = \sum_{i=1,2,3} \Delta\epsilon_i$. Первое пропорционально $\Delta\theta$ и поэтому пренебрежимо мало

$$\Delta\epsilon_1 = -\Delta\theta \epsilon'_0 \frac{\sqrt{2} - \text{ctg } \theta_0}{\sqrt{2} + \text{tg } \theta_0} = 2.0 \cdot 10^{-4}. \quad (32)$$

Второе связано с поправками от разложений констант и масс конституентных кварков. Такая поправка пропорциональна δ_M и в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon_2 &= -\frac{\delta_M \epsilon_0}{M_0} \left[m_s - \hat{m} + (m_s + \hat{m}) \left(\frac{\sin 2\theta_0}{2\sqrt{2}} - \sin^2 \theta_0 \right) \right] = \\ &= -0.145 \epsilon_0. \end{aligned} \quad (33)$$

Третье слагаемое описывает вклад взаимодействия нарушающего правило ОЦИ, а также вклад аксиальной аномалии через явное нарушение киральной симметрии

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon_3 &= \sqrt{2}\Delta_N\epsilon_0 \sin\theta_0 \left[\frac{1}{\cos\theta_0 - \sqrt{2}\sin\theta_0} + \cos\theta_0 \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(1 + \frac{3\hat{m}\sin\theta_0}{(m_s - \hat{m})(\sin\theta_0 + \sqrt{2}\cos\theta_0)} \right) \right] = \\ &= -0.222\epsilon_0. \end{aligned} \quad (34)$$

В сумме $\epsilon = \epsilon_0 + \Delta\epsilon$ это ведет к фактору, который восстанавливает результат работы [27]

$$\epsilon = \epsilon_0(1 - 0.367) = 0.011 \simeq \bar{\epsilon}_0. \quad (35)$$

Из приведенных оценок видно, что основную роль в восстановлении результата [27] играет вклад глюонной аномалии, которая через описанный выше механизм подавляет влияние η - η' смешивания на амплитуду распада $\eta \rightarrow 3\pi$, которая, как известно, пропорциональна ϵ . Это объясняет, почему в данном процессе эффект нарушения изоспиновой симметрии мал, хотя рассмотрение лидирующего приближения указывает на обратное.

В заключение хочу подчеркнуть, что описанный здесь механизм подавления глюонной аномалией эффектов, связанных с нарушением флейворной и изотопической симметрий, имеет общий характер, несмотря на то, что все рассуждения здесь проводились в рамках $1/N_c$ модели НИЛ. Это следует из прямой связи между константами рассматриваемой здесь модели и константами $1/N_c\chi\text{ТВ}$. При этом численные значения параметров $1/N_c\chi\text{ТВ}$, получаемые на основе модели НИЛ, находятся в прекрасном согласии с их феноменологическими значениями (за исключением параметра Λ_1 , который отсутствует в модели НИЛ).

1. S. Weinberg, Phys. Rev. D **11**, 3583 (1975).
2. G. 't Hooft, Nucl. Phys. B **72**, 461 (1974).
3. E. Witten, Nucl. Phys. B **160**, 57 (1979).

4. H. Leutwyler, Phys. Lett. B **374**, 163 (1996).
5. H. Leutwyler, Phys. Lett. B **374**, 181 (1996).
6. R. Kaiser and H. Leutwyler, Eur. Phys. J. C **17**, 623 (2000).
7. P. Herrera-Siklody, J.I. Latorre, P. Pascual, and J. Taron, Nucl. Phys. B **497**, 345 (1997).
8. A. A. Osipov, JETP Lett. **115**(6), 30 (2022).
9. A. A. Osipov, JETP Lett. **115**, 371 (2022).
10. A. A. Osipov, arXiv:hep-ph/2302.14118 (2023).
11. A. A. Osipov, arXiv:hep-ph/2303.01865 (2023).
12. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
13. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **124**, 246 (1961).
14. M. K. Volkov, ЭЧАЯ **17**, 432 (1986).
15. D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B **271**, 188 (1986).
16. A. A. Osipov, JETP Lett. **113**(6), 413 (2021).
17. A. A. Osipov, Phys. Lett. B **817**, 136300 (2021).
18. A. A. Osipov, Phys. Rev. D **104**(10), 105019 (2021).
19. G. Veneziano, Nucl. Phys. B **159**, 213 (1979).
20. C. Rosenzweig, J. Schechter, and G. Trahern, Phys. Rev. D **21**, 3388 (1980).
21. P. Di Vecchia and G. Veneziano, Nucl. Phys. B **171**, 253 (1980).
22. P. Di Vecchia, F. Nicodemi, R. Pettorino, and G. Veneziano, Nucl. Phys. B **181**, 318 (1981).
23. G. Cvetič, Ann. Physics **255**, 165 (1997).
24. A. Manohar and H. Georgi, Nucl. Phys. B **234**, 189 (1984).
25. H. Leutwyler, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **64**, 223 (1998).
26. J. L. Goity, A. M. Bernstein, and B. R. Holstein, Phys. Rev. D **66**, 076014 (2002).
27. D. J. Gross, S. B. Treiman, and F. Wilczek, Phys. Rev. D **19**, 2188 (1979).
28. P. Kroll, Mod. Phys. Lett. A **20**, 2667 (2005).

Естественное объяснение недавних результатов исследования $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$

А. И. Мильштейн⁺⁺¹⁾, С. Г. Сальников⁺⁺¹⁾

⁺Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

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

Поступила в редакцию 16 мая 2023 г.

После переработки 16 мая 2023 г.

Принята к публикации 18 мая 2023 г.

Мы показали, что недавние экспериментальные результаты исследования процесса $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ вблизи порога могут быть прекрасно объяснены взаимодействием Λ и $\bar{\Lambda}$ в конечном состоянии. Быстрый рост сечения вблизи порога реакции связан с существованием слабосвязанного состояния или виртуального уровня в соответствующем потенциале. Приведена простая аналитическая формула, которая очень хорошо описывает экспериментальные данные.

DOI: 10.31857/S1234567823120054, EDN: evdxcg

В последнее время появились новые экспериментальные результаты изучения процесса аннигиляции $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ вблизи порога [1]. Они согласуются с результатами предыдущих работ [2–4], но имеют гораздо более высокую точность. В экспериментах наблюдается сильная энергетическая зависимость сечения вблизи порога. Аналогичный эффект проявляется в процессах $e^+e^- \rightarrow p\bar{p}$ [5–12], $e^+e^- \rightarrow n\bar{n}$ [13–15], $e^+e^- \rightarrow \Lambda_c\bar{\Lambda}_c$ [16, 17], $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}$ [18], и других. Во всех случаях формы околопороговых резонансов существенно отличаются от стандартной параметризации Брейта–Вигнера. Происхождение этого явления естественно объясняется сильным взаимодействием рожденных частицы, вблизи порога (так называемое взаимодействие в конечном состоянии). Поскольку типичное значение соответствующего потенциала достаточно велико (сотни МэВ), то возможно существование или слабосвязанного состояния, или виртуального уровня. В последнем случае небольшое углубление потенциала приводит к возникновению слабосвязанного состояния. В обоих случаях значение волновой функции (или ее производной) внутри потенциальной ямы значительно превышает значение волновой функции в отсутствие взаимодействия в конечном состоянии. В результате энергетическая зависимость волновой функции внутри потенциальной ямы является очень сильной. Так как кварки в e^+e^- аннигиляции рождаются на малых расстояниях $\sim 1/\sqrt{s}$, сильная энергетическая зависимость сечения вблизи порога определяется исключительно энергетической

зависимостью волновой функции рожденной пары адронов на малых расстояниях. Такой естественный подход позволяет хорошо описать энергетическую зависимость практически всех известных околопороговых резонансов (см. [19–25] и ссылки в этих работах).

Процесс аннигиляции $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ вблизи порога является наиболее простым для исследования. Это связано с тем, что система $\Lambda\bar{\Lambda}$ имеет фиксированный изотопический спин $I = 0$, пара рождается в основном в состоянии с угловым моментом $l = 0$ (вкладом состояния с $l = 2$ можно пренебречь), и кулоновское взаимодействие между Λ и $\bar{\Lambda}$ отсутствует. Кроме того, наш анализ показывает, что мнимая часть оптического потенциала взаимодействия $\Lambda\bar{\Lambda}$, которая учитывает возможность аннигиляции пары $\Lambda\bar{\Lambda}$ в мезоны, мало влияет на сечение. Поэтому можно пренебречь мнимой частью потенциала. В результате, сечение процесса $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ может быть описано простой формулой (см. подробности в [25] и в указанных там ссылках):

$$\sigma = \frac{2\pi\beta\alpha^2}{s} g^2 F_D^2(s) |\psi(0)|^2, \quad (1)$$

где $\beta = k/M_\Lambda$ – скорость бариона, $k = \sqrt{M_\Lambda E}$, $s = (2M_\Lambda + E)^2$, E – кинетическая энергия пары, $F_D(s) = (1 - s/\Lambda^2)^{-2}$ – дипольный формфактор, Λ – некоторый параметр, близкий к 1 ГэВ. Множитель g связан с вероятностью рождения пары на малых расстояниях $\sim 1/\sqrt{s}$ и может рассматриваться как независящая от энергии константа. В уравне-

¹⁾ A.I.Milstein@inp.nsk.su; S.G.Salnikov@inp.nsk.su

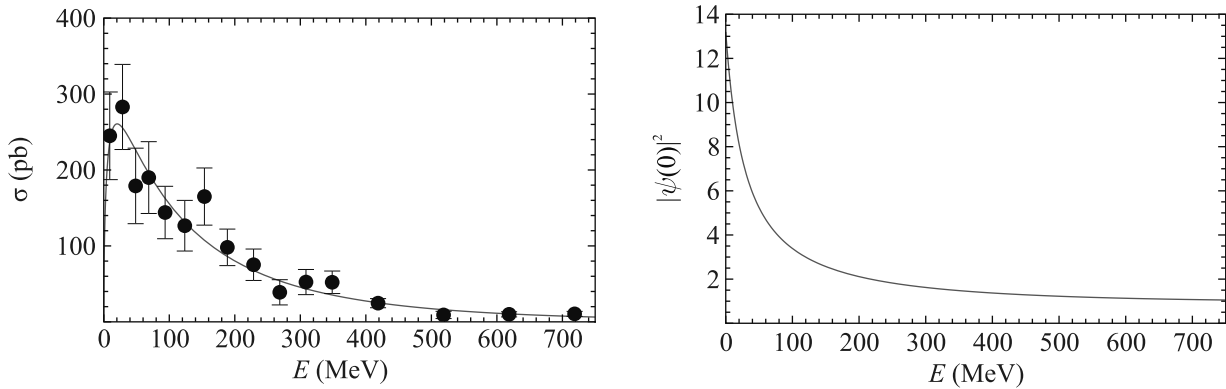


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость от энергии E сечения аннигиляции $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ (левый рисунок) и фактора усиления $|\psi(0)|^2$ (правый рисунок). Использованы параметры потенциала $U_0 = 584$ МэВ и $R = 0.45$ фм. Экспериментальные данные взяты из работы [1]

нии (1) $\psi(0)$ является волновой функцией пары $\Lambda\bar{\Lambda}$ при $r = 0$.

Сечение (1) усиливается множителем $|\psi(0)|^2 \gg 1$, если существует слабосвязанное состояние или виртуальный уровень $\Lambda\bar{\Lambda}$ пары. В обоих случаях величина $|a|$ (a – длина рассеяния Λ и $\bar{\Lambda}$) велика по сравнению с характерным радиусом R потенциала взаимодействия $\Lambda\bar{\Lambda}$. Для слабосвязанного состояния a положительна и энергия связи равна $\varepsilon = -1/M_\Lambda a^2$. Для виртуального уровня a отрицательна, а энергия этого уровня определяется как $\varepsilon = 1/M_\Lambda a^2$. В обоих случаях $|\varepsilon|$ намного меньше, чем характерная глубина потенциальной ямы. Энергетическая зависимость $|\psi(0)|^2$ для околопороговых резонансов является более-менее универсальной и определяется длиной рассеяния a и эффективным радиусом взаимодействия [26]. Поэтому можно использовать любую удобную форму потенциала $U(r)$ для описания околопороговых резонансов.

В нашей работе мы параметризуем потенциал формулой $U(r) = -U_0\theta(R-r)$. Для этого потенциала энергетическая зависимость $|\psi(0)|^2$ хорошо известна (см., например, учебник [26]):

$$|\psi(0)|^2 = \frac{q^2}{q^2 \cos^2(qR) + k^2 \sin^2(qR)}, \quad (2)$$

$$q = \sqrt{M_\Lambda(E + U_0)}.$$

Вблизи порога имеем $k \ll q$, и сечение (1) усилено, если

$$q_0 R = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) + \delta, \quad |\delta| \ll 1, \quad (3)$$

где $q_0 = \sqrt{M_\Lambda U_0}$ и n – целое число. При $|\delta| \ll 1$ длина рассеяния $a = 1/q_0\delta$, где $\delta > 0$ для связанного состо-

яния и $\delta < 0$ для виртуального уровня. С помощью уравнения (3) выражение (2) можно упростить:

$$|\psi(0)|^2 \approx \frac{\gamma U_0}{(E + \varepsilon_0)^2 + \gamma E},$$

$$\gamma = 4\kappa^2 U_0, \quad \varepsilon_0 = 2\delta \kappa U_0, \quad \kappa = \frac{1}{\pi(n + 1/2)}. \quad (4)$$

Соответствующая энергетическая зависимость сечения (1) эквивалентна формуле Флатте [27], которая выражается через длину рассеяния и эффективный радиус взаимодействия r_0 . Заметим, что для прямоугольной потенциальной ямы $r_0 = R$. Нетрудно проверить, что точная и приближенная формулы для сечения хорошо согласуются друг с другом для $|\delta| \ll 1$ и $E \lesssim \varepsilon_0 \ll U_0$. Обратим внимание на то, что $|\varepsilon_0| \gg |\varepsilon|$ как для связанного состояния, так и для виртуального уровня, а именно $\varepsilon_0 \approx 2|\varepsilon|a/R$. Однако положение пика в сечении, которое пропорционально $\sqrt{E}|\psi(0)|^2$, находится при энергии $E \approx |\varepsilon|$ в обоих случаях.

На рисунке 1 показано сравнение наших предсказаний для сечения с экспериментальными данными [1], а также коэффициент усиления $|\psi(0)|^2$. Использованы следующие параметры модели: $U_0 = 584$ МэВ, $R = 0.45$ фм и $g = 0.2$. В рассматриваемой области энергий зависимость наших предсказаний от параметра Λ очень слабая. Для определенности мы использовали значение $\Lambda = 1$ ГэВ. Наша модель, дающая $\chi^2/N_{\text{df}} = 9.8/13$, хорошо описывает экспериментальные данные [1]. Видно, что учет коэффициента усиления $|\psi(0)|^2$ является очень важным для корректного описания экспериментальных данных.

В рамках нашей модели мы также предсказываем связанное состояние с энергией связи $E_0 \approx -30$ МэВ.

Наблюдение этого связанного состояния является очень важным. Результаты работ [28–36] указывают на аномальное поведение сечений процессов $e^+e^- \rightarrow K^+K^-\pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow 2(K^+K^-)$, $e^+e^- \rightarrow \phi K^+K^-$ и других при $\sqrt{s} \approx 2.2$ ГэВ (это значение s соответствует $E_0 \approx -30$ МэВ). Однако требуется более подробное изучение этой энергетической области.

В заключение, предположение о существовании слабосвязанного состояния или виртуального уровня позволило нам достаточно точно описать недавние и предыдущие экспериментальные данные для сечения аннигиляции $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$ вблизи порога. Наша модель указывает на возможное существование связанного состояния $\Lambda\bar{\Lambda}$ с энергией $E_0 \approx -30$ МэВ.

Мы выражаем благодарность А. Е. Бондарю за полезные обсуждения.

1. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **107**, 072005 (2023).
2. B. Aubert, M. Bona, D. Boutigny et al. (BABAR Collaboration), Phys. Rev. D **76**, 092006 (2007).
3. M. Ablikim, M. N. Achasov, S. Ahmed et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **97**, 032013 (2018).
4. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson, M. Ablikim et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. Lett. **123**, 122003 (2019).
5. B. Aubert, R. Barate, D. Boutigny et al. (BABAR Collaboration), Phys. Rev. D **73**, 012005 (2006).
6. J. P. Lees, V. Poireau, V. Tisserand et al. (BABAR Collaboration), Phys. Rev. D **87**, 092005 (2013).
7. R. R. Akhmetshin, A. N. Amirkhanov, A. V. Anisenkov et al. (CMD-3 Collaboration), Phys. Lett. B **759**, 634 (2016).
8. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. Lett. **124**, 042001 (2020).
9. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Lett. B **817**, 136328 (2021).
10. R. R. Akhmetshin, A. N. Amirkhanov, A. V. Anisenkov et al. (CMD-3 Collaboration), Phys. Lett. B **794**, 64 (2019).
11. M. Ablikim, M. N. Achasov, X. C. Ai et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **91**, 112004 (2015).
12. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **99**, 092002 (2019).
13. M. N. Achasov, A. Yu. Barnyakov, K. I. Beloborodov et al. (SND Collaboration), Phys. Rev. D **90**, 112007 (2014).
14. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Nat. Phys. **17**, 1200 (2021).
15. M. N. Achasov, A. Yu. Barnyakov, K. I. Beloborodov et al. (SND Collaboration), Eur. Phys. J. C **82**, 761 (2022).
16. G. Pakhlova, I. Adachi, H. Aihara et al. (BELLE Collaboration), Phys. Rev. Lett. **101**, 172001 (2008).
17. M. Ablikim, M. N. Achasov, S. Ahmed et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. Lett. **120**, 132001 (2018).
18. B. Aubert, M. Bona, Y. Karyotakis et al. (BABAR Collaboration), Phys. Rev. Lett. **102**, 012001 (2009).
19. J. Haidenbauer, X.-W. Kang, and U.-G. Meißner, Nucl. Phys. A **929**, 102 (2014).
20. J. Haidenbauer and U.-G. Meißner, Phys. Lett. B **761**, 456 (2016).
21. J. Haidenbauer, U.-G. Meißner, and L.-Y. Dai, Phys. Rev. D **103**, 014028 (2021).
22. A. I. Milstein and S. G. Salnikov, Phys. Rev. D **104**, 014007 (2021).
23. A. I. Milstein and S. G. Salnikov, Phys. Rev. D **105**, 074002 (2022).
24. A. I. Milstein and S. G. Salnikov, Phys. Rev. D **105**, L031501 (2022).
25. A. I. Milstein and S. G. Salnikov, Phys. Rev. D **106**, 074012 (2022).
26. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics – Non-relativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford (1991).
27. S. M. Flatté, Phys. Lett. B **63**, 224 (1976).
28. B. Aubert, M. Bona, D. Boutigny et al. (BABAR Collaboration), Phys. Rev. D **76**, 012008 (2007).
29. Y.-W. Chang, M.-Z. Wang, I. Adachi et al. (BELLE Collaboration), Phys. Rev. D **79**, 052006 (2009).
30. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **100**, 032009 (2019).
31. M. Ablikim, M. N. Achasov, S. Ahmed et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **99**, 032001 (2019).
32. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. Lett. **124**, 112001 (2020).
33. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **102**, 012008 (2020).
34. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. D **104**, 032007 (2021).
35. M. Ablikim, M. N. Achasov, P. Adlarson et al. (BESIII Collaboration), arXiv:2112.13219 [hep-ex].
36. L. Xia, Supl. la Rev. Mex. Física **3**, 1 (2022).

Учет энергетического распределения свободных носителей в скоростных уравнениях, описывающих их динамику при взаимодействии диэлектриков с мощным лазерным излучением

К. В. Львов⁺¹⁾, С. Ю. Стремоухов^{+*}

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

^{*}Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 132182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2023 г.

После переработки 12 мая 2023 г.

Принята к публикации 22 мая 2023 г.

Проведено исследование динамики свободных носителей в CaF_2 , индуцированных мощным фемтосекундным лазерным излучением ближнего (1.24 мкм) и среднего (4.4 мкм) инфракрасного диапазонов. Показано, что при флюенсах лазерного излучения, достаточных для активного действия ударной ионизации, после прохождения лазерного импульса формируется такое распределение носителей по энергии, форма которого не зависит от параметров лазерного излучения (флюенса, длительности, длины волны) и ширины запрещенной зоны материала. При этом средняя кинетическая энергия свободных носителей после действия импульса составляет 0.56 от ширины запрещенной зоны. Учет дисперсионного слагаемого в скоростных моделях динамики носителей позволяет снизить на 30 % расхождение в средней кинетической энергии со статистической моделью Фоккера–Планка. Применение скоростных моделей динамики носителей вместо требующих больших временных и вычислительных ресурсов статистических моделей позволяет проводить расчеты в несколько десятков раз быстрее.

DOI: 10.31857/S1234567823120066, EDN: evvooq

Введение. Одним из механизмов генерации гармоник в диэлектриках при воздействии на них мощного фемтосекундного лазерного излучения является динамика свободных носителей в зоне проводимости, индуцированных лазерным излучением [1–4]. Возбуждение в среде свободных носителей обуславливает поглощение лазерной энергии и дефокусировку лазерного пучка при его распространении через среду. К настоящему времени развиты различные экспериментальные методы диагностики состояния среды и определения энергетических порогов модификации ее объема: оптическая микроскопия локального изменения показателя преломления [5], регистрация изменения коэффициента пропускания [6], темнопольная микроскопия [7, 8]. Комплексное исследование диагностики состояния среды производится в тесном контакте экспериментальных исследований с теоретическими расчетами. Например, задача генерации мощного когерентного излучения требует теоретического рассмотрения откликов электронов в атоме на лазерное поле и формирование ими макроскопического тока носителей [9]. Для разработки способов получения сверхкоротких лазерных им-

пульсов необходимо более тщательное изучение механизмов воздействия лазерного поля на среду [10]. Изучение методов модификации поверхности и объема материалов невозможно без анализа механизмов передачи лазерной энергии твердому телу [11, 12]. Эти важные для практического применения научные задачи требуют исследования процессов генерации свободных электронов в диэлектриках и полупроводниках и их динамики в зоне проводимости, вызванной действием мощного фемтосекундного лазерного излучения.

Наиболее корректными с физической точки зрения моделями динамики свободных носителей являются статистические модели, основанные на уравнении Больцмана [13, 14], либо его упрощении – уравнении Фоккера–Планка [15, 16]. Согласно последнему, динамика плотности распределения носителей $f(\varepsilon, t)$ в зоне проводимости описывается уравнением:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{1}{3} \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left(\frac{4}{3} \varepsilon \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \right) + S_\varepsilon(\varepsilon, t), \quad (1)$$

где $S_\varepsilon(\varepsilon, t)$ – плотность генерации (или рекомбинации) носителей, $E^2(t)$ – квадрат огибающей ла-

¹⁾e-mail: lvov.kv14@physics.msu.ru

зерного поля, ε – кинетическая энергия носителей, $\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2 \nu(\varepsilon)}{m_e(\nu^2(\varepsilon) + \omega^2)}$ – проводимость носителей, e – заряд электрона, m_e – эффективная масса носителей, $\nu(\varepsilon)$ – частота столкновений носителей, ω – частота лазерного поля.

Правая часть уравнения (1) – первые два слагаемых в разложении уравнения Больцмана по полиномам Лежандра. Первое слагаемое описывает лазерный нагрев свободных носителей, в то время как второе слагаемое – дисперсию плотности распределения носителей по энергии. Второе слагаемое может быть истолковано как диффузия носителей по энергетическому спектру с характерным “коэффициентом диффузии” $D = \frac{2}{3} \varepsilon \sigma(\varepsilon) E^2(t)$. С физической точки зрения оно означает “расплывание” плотности носителей по энергетическому спектру при наличии локальных градиентов в плотности распределения носителей, возникающих, например, при фотоионизации или ударной ионизации.

Несмотря на высокую точность расчетов по модели Фоккера–Планка (F-Pl), ее применение в задаче распространения лазерного излучения через вещество выглядит плохо реализуемым из-за большой длительности вычислений и повышенных требований к производительности вычислительных машин.

Альтернативой статистическим моделям служат скоростные модели динамики носителей, описывающих их распределение по конечному числу дискретных уровней энергии в зоне проводимости: SRE (*Single Rate Equation*) [17], MRE (*Multiple Rate Equation*) [18] и другие модификации этих моделей, учитывающих все более тонкие эффекты. Так, например, в улучшенной модели MRE (EMRE) [19] учитываются столкновения электронов между собой и с нейтральными атомами, вводится усредненный уровень, учитывающий наличие носителей выше верхнего энергетического уровня, а также рассматривается ударная ионизация по модели Келдыша [20]. В модели [21], также основанной на MRE, добавляется взаимодействие электронов с фононами, предлагается использовать ее для определения порога лазерного пробоя полупроводников. Ключевой особенностью всех существующих скоростных моделей является их учет только первого слагаемого в правой части уравнения (1), описывающего нагрев носителей под действием лазерного излучения.

В данной работе исследуется динамика носителей с учетом дисперсионного слагаемого (второе слагаемое в правой части уравнения (1)), описывающее “расплывание” плотности распределения носителей по зоне проводимости. Дисперсионное слагаемое внедряется в модель EMRE [19] и анализируются

его влияние на генерируемую плотность индуцированных носителей и их среднюю кинетическую энергию при воздействии мощного фемтосекундного лазерного излучения на диэлектрическую среду. Кроме того, в работе демонстрируется способ учета в модели EMRE распределения носителей в высокоэнергетической части энергетического спектра.

Методы.

Модель Фоккера–Планка (F-Pl). В уравнении Фоккера–Планка (1) в качестве источника свободных носителей рассматривается фотоионизация, скорость которой $W(I(t))$ зависит от интенсивности лазерного излучения $I(t)$ и описывается формулой Келдыша [22], а также ударная ионизация $\nu_{\text{imp}}(\varepsilon)$:

$$S_\varepsilon(\varepsilon, t) = w(\varepsilon, I(t)) - \nu_{\text{imp}}(\varepsilon) f(\varepsilon, t) + 2\beta \nu_{\text{imp}}(\beta \varepsilon) f(\beta \varepsilon, t). \quad (2)$$

Скорость ударной ионизации $\nu_{\text{imp}}(\varepsilon)$ отлична от нуля только для тех носителей, чья энергия превышает критическое значение $\varepsilon_{cr} = \left(1 + \frac{m_r}{m_h}\right) E_g$, где m_r – приведенная масса электрона и дырки, чьи эффективные массы равны m_e и m_h , E_g – ширина запрещенной зоны. Выражение для $\nu_{\text{imp}}(\varepsilon)$ было получено Келдышем в работе [20], однако только для энергий, близких к критическому значению: $\varepsilon - \varepsilon_{cr} \ll \varepsilon_{cr}$. Поскольку при численном решении уравнения (1) учитываются также области энергии $\varepsilon \gg \varepsilon_{cr}$, то требуется использовать более общую формулу, полученную в работе [23]:

$$\nu_{\text{imp}}(\varepsilon) = \rho_{\text{at}} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} \cdot 4\pi a_0^2 \left(\frac{Ry}{E_g}\right)^2 \cdot \frac{\varepsilon_{cr}}{\varepsilon} \cdot \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{cr}}{\varepsilon + \varepsilon_{cr}}\right)^{3/2} \cdot \left(1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{\varepsilon_{cr}}{2\varepsilon}\right) \ln \left(2.7 + \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{cr}} - 1}\right)\right), \quad (3)$$

где ρ_{at} – плотность атомов, a_0 – боровский радиус, Ry – постоянная Ридберга.

Числовой коэффициент β в (2) показывает, во сколько раз уменьшается энергия электрона, участвующего в одном акте ударной ионизации. В предположении параболичности валентной зоны и зоны проводимости значение этого коэффициента напрямую следует из законов сохранения энергии и импульса:

$$\beta = \left(\frac{2 - m_r/m_e}{1 - m_r/m_e}\right)^2. \quad (4)$$

Нагрев носителей в лазерном поле определяется проводимостью $\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2 \nu(\varepsilon)}{m_e(\nu^2(\varepsilon) + \omega^2)}$, при этом учитывались только электрон-электронные и электрон-нейтральные столкновения, зависимость частоты ко-

торых от энергии носителей задается следующими выражениями [24]:

$$\begin{aligned}\nu(\varepsilon) &= \nu_{ee}(\varepsilon) + \nu_{en}(\varepsilon), \\ \nu_{ee}(\varepsilon) &= \rho \langle \nu \rangle \sigma_{ee} = \frac{32\epsilon_0}{3e^2} \sqrt{\frac{2\pi\varepsilon}{3m_e}} \varepsilon_{\text{mean}}, \\ \nu_{en}(\varepsilon) &= (\rho_{\text{at}} - \rho) \langle \nu \rangle \sigma_{en} \approx \sqrt{\frac{16\varepsilon}{3\pi m_e}} (\rho_{\text{at}} - \rho) \sigma_{en},\end{aligned}\quad (5)$$

где $\langle \nu \rangle$ – средняя скорость носителей с энергией ε , ϵ_0 – диэлектрическая постоянная, $\varepsilon_{\text{mean}}$ – средняя кинетическая энергия носителей, ρ – полная плотность свободных носителей, $\sigma_{en} \approx 3 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ – сечение электрон-нейтральных столкновений.

В данной работе по результатам расчетов динамики плотности распределения носителей в зоне проводимости вычислялись полная плотность свободных носителей $\rho(t)$:

$$\rho(t) = \int_0^\infty f(\varepsilon, t) d\varepsilon \quad (6)$$

и средняя кинетическая энергия носителей $\varepsilon_{\text{mean}}(t)$:

$$\varepsilon_{\text{mean}}(t) = \frac{\int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon, t) d\varepsilon}{\rho(t)}. \quad (7)$$

Для численного решения уравнения Фоккера–Планка (1) была построена 6-точечная разностная схема, которая является явной по времени и неявной по энергии. На каждом шаге по времени методом прогонки вычислялись значения плотности распределения $f(\varepsilon, t)$ для каждого значения энергии, при этом граничные условия при $\varepsilon \rightarrow \infty$ обеспечивали условие $f(\varepsilon \rightarrow \infty, t) \rightarrow 0$ а граничные условия при $\varepsilon = 0$ – неизменность полной плотности носителей в отсутствии источников носителей (при $S(\varepsilon, t) = 0$).

Уравнение Фоккера–Планка, являющееся приближением уравнения Больцмана, справедливо, если средняя энергия, полученная носителями в электрическом поле за среднее время столкновений, меньше энергии носителей [15]: $\frac{e^2 E^2 \nu}{m_e(\omega^2 + \nu^2)} \cdot \frac{1}{\nu} < \varepsilon$. Из этого условия можно получить оценку максимальной интенсивности лазерного излучения I_{max} , при которой модель F-P1 остается справедливой:

$$I_{\text{max}} = \frac{\varepsilon m_e \omega^2 c n_0 \epsilon_0}{2e^2} \approx 4 \cdot 10^{12} \cdot \frac{E_g [\text{эВ}]}{\lambda^2 [\text{мкм}]} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2}, \quad (8)$$

где c – скорость света в вакууме, n_0 – показатель преломления среды, λ – длина волны лазерного излучения.

Модель EMRE. В скоростной модели динамики свободных носителей EMRE, используемой в данной

работе, плотность распределения носителей $f(\varepsilon, t)$ в зоне проводимости заменяется на уровни энергии $\varepsilon_k = k\Delta\varepsilon$, отделенные друг от друга энергией фотона $\Delta\varepsilon = \hbar\omega$ и характеризующиеся населенностью $\rho_k(t) = \int_{\varepsilon_k - \Delta\varepsilon/2}^{\varepsilon_k + \Delta\varepsilon/2} f(\varepsilon, t) d\varepsilon$ (рис. 1). Динамика населенностей уровней энергии описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений, которая подробно описана в [19]. Модель EMRE основывается на более известной модели MRE [18], однако отличается от нее двумя особенностями:

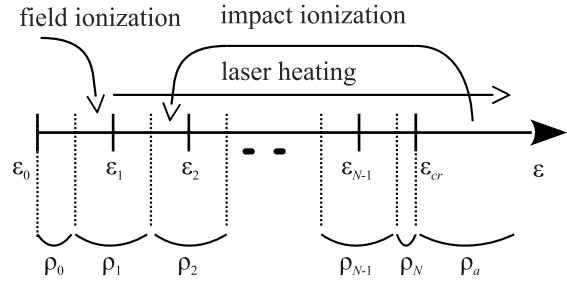


Рис. 1. Схема энергетических уровней и процессы, определяющие динамику свободных носителей в модели EMRE

1) скорости однофотонного поглощения $\alpha_{1ph}(\varepsilon)$ и ударной ионизации $\nu_{\text{imp}}(\varepsilon)$ зависят от энергии носителей (см. формулы (3), (5));

2) все уровни энергии, расположенные выше критического значения энергии ε_{cr} , объединены в один усредненный уровень, характеризующийся населенностью $\rho_a(t)$ и плотностью энергии $u_a(t)$:

$$\begin{aligned}\rho_a(t) &= \int_{\varepsilon_{cr}}^\infty f(\varepsilon, t) d\varepsilon, \\ u_a(t) &= \int_{\varepsilon_{cr}}^\infty \varepsilon f(\varepsilon, t) d\varepsilon.\end{aligned}\quad (9)$$

Для внедрения дисперсионного слагаемого (второго слагаемого в правой части уравнения (1)) в модель EMRE, уравнение (1) было проинтегрировано по интервалам энергии $[\varepsilon_k - \Delta\varepsilon/2, \varepsilon_k + \Delta\varepsilon/2]$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_k}{\partial t} &= -\frac{1}{3} \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \Big|_{\varepsilon_k + \Delta\varepsilon/2} + \\ &+ \frac{1}{3} \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \Big|_{\varepsilon_k - \Delta\varepsilon/2} + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{4}{3} \varepsilon \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \right) \Big|_{\varepsilon_k + \Delta\varepsilon/2} - \\ &- \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{4}{3} \varepsilon \sigma(\varepsilon) E^2(t) f(\varepsilon, t) \right) \Big|_{\varepsilon_k - \Delta\varepsilon/2} + S(\varepsilon_k, t).\end{aligned}\quad (10)$$

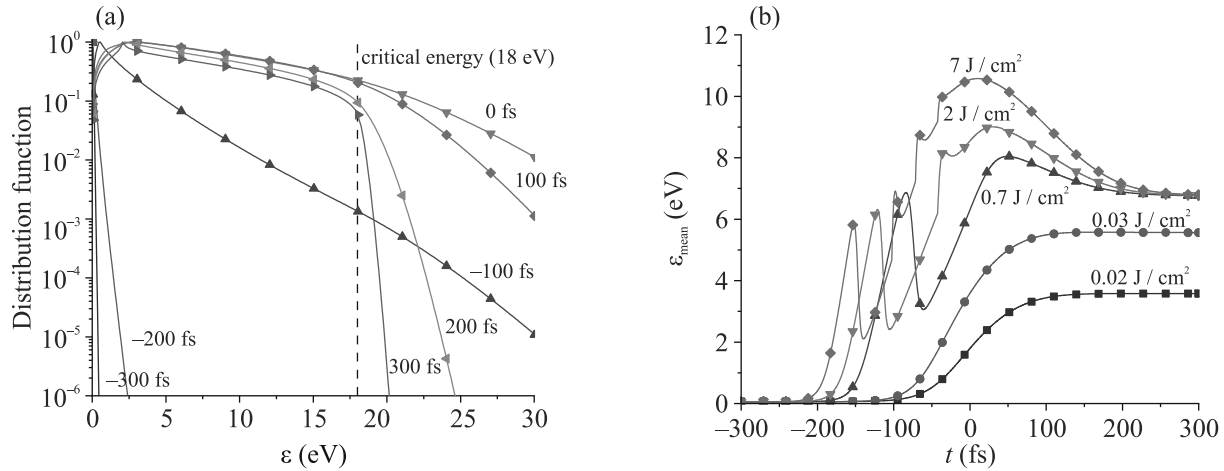


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Плотность распределения носителей по зоне проводимости для разных моментов времени при прохождении через CaF_2 лазерного импульса с флюенсом $F = 2 \text{ Дж/см}^2$. Кривые нормированы на максимальное значение. (б) – Динамика средней кинетической энергии носителей при разных флюенсах лазерного излучения. Длина волны $\lambda = 1.24 \text{ мкм}$

Применяя конечно-разностную аппроксимацию производной по энергии и оценку $f(\epsilon_k, t) \approx \frac{\rho_k(t)}{\Delta\epsilon}$, получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} = & \frac{E^2(t)}{3\Delta\epsilon} \cdot \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{2\epsilon_{k-1}}{\Delta\epsilon} \right) \sigma(\epsilon_{k-1}) \rho_{k-1} + \right. \\ & \left. + \frac{4\epsilon_k}{\Delta\epsilon} \sigma(\epsilon_k) \rho_k + \left(-\frac{1}{2} + \frac{2\epsilon_{k+1}}{\Delta\epsilon} \right) \sigma(\epsilon_{k+1}) \rho_{k+1} \right) + \\ & + S(\epsilon_k, t). \end{aligned} \quad (11)$$

Совершенно аналогично модернизируется уравнение для населенности ρ_a усредненного уровня и плотности его энергии u_a . При этом делается предположение об экспоненциальном затухании плотности распределения при энергиях выше критического уровня:

$$f(\epsilon > \epsilon_{cr}) = f(\epsilon_{cr}) e^{-\frac{\epsilon - \epsilon_{cr}}{\delta\epsilon}} = \frac{\rho_a^2}{u_a} e^{-\frac{\epsilon - \epsilon_{cr}}{\frac{u_a}{\rho_a} - \epsilon_{cr}}}, \quad (12)$$

что подтверждается результатами моделирования при решении уравнения Фоккера–Планка (1) (см. рис. 2а). Величина $\delta\epsilon$ является шириной распределения носителей на усредненном уровне. С учетом экспоненциального распределения свободных носителей в области $\epsilon > \epsilon_{cr}$, для населенности ρ_a и плотности энергии u_a усредненного уровня скоростные уравнения будут следующими:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_a}{\partial t} = & E^2(t) \sigma(\epsilon_{cr}) \frac{\rho_a^2}{u_a - \epsilon_{cr} \rho_a} - \\ & - \frac{2}{3} E^2(t) \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\epsilon_{cr} \sigma(\epsilon_{cr}) f(\epsilon_{cr})), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_a}{\partial t} = & E^2(t) \rho_a \left(\sigma(\epsilon_{cr}) \frac{\epsilon_{cr} \rho_a}{u_a - \epsilon_{cr} \rho_a} + \sigma \left(\frac{u_a}{\rho_a} \right) \right) + \\ & + \frac{2}{3} E^2(t) \left(\epsilon_{cr} \sigma(\epsilon_{cr}) f(\epsilon_{cr}) - \right. \\ & \left. - \epsilon_{cr} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\epsilon_{cr} \sigma(\epsilon_{cr}) f(\epsilon_{cr})) \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Результаты и обсуждение. Динамика свободных носителей исследовалась в диэлектрике CaF_2 (ширина запрещенной зоны 12 эВ, эффективная масса носителей $m_e = m_h = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, плотность атомов $\rho_{at} = 5.6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$), на который падает мощное фемтосекундное лазерное излучение длительностью 170 фс (с гауссовской формой огибающей) и флюенсом до $F = 8 \text{ Дж/см}^2$. Начальное распределение носителей по зоне проводимости было выбрано экспоненциальным (что оправдано в силу широкозонности выбранного материала), так чтобы полная плотность носителей составляла величину $\rho_0 = 10^{-20} \rho_{at}$ (что обусловлено возможным наличием примесей и дефектов в решетке диэлектрика), а средняя кинетическая энергия носителей – $\epsilon_{mean} = 0.04 \text{ эВ}$ (что соответствует комнатной температуре). Исследовалось два диапазона длин волн: ближний инфракрасный ($\lambda = 1.24 \text{ мкм}$, соответствует излучению хром-форстеритового лазера) и средний инфракрасный ($\lambda = 4.4 \text{ мкм}$, соответствует излучению $\text{Fe}^{2+}:\text{ZnSe}$ лазера [11]). Заметим, что, согласно (8), модель F-P1 применима при интенсивностях лазерного излучения, по порядку величины, меньших чем 40 ТВт/см^2 (при $\lambda = 1.24 \text{ мкм}$), что соответствует флюенсу лазерного излучения $F = 5.8 \text{ Дж/см}^2$, и 10 ТВт/см^2

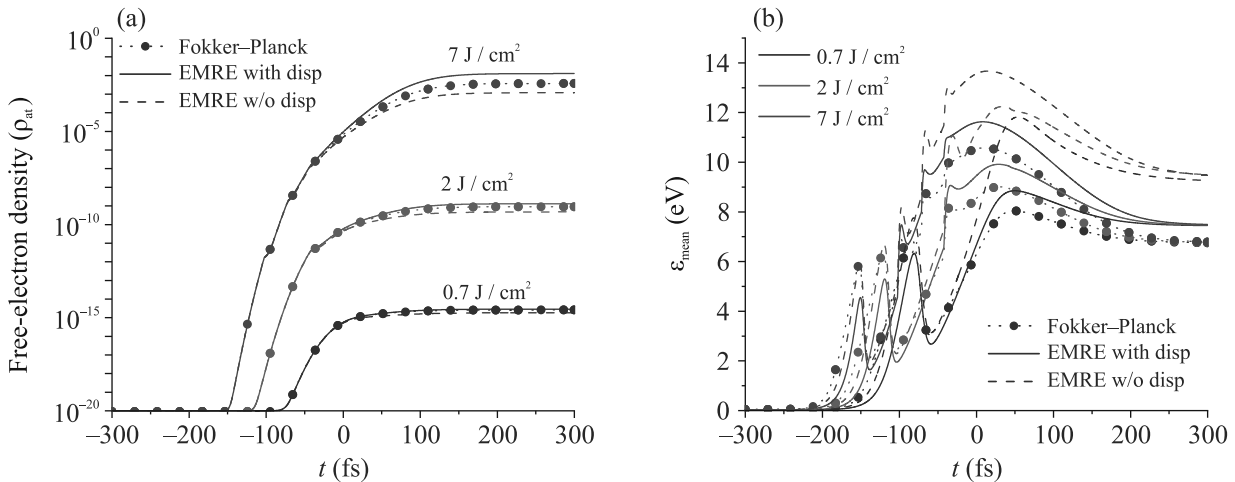


Рис. 3. (Цветной онлайн) Динамика: (a) – полной плотности свободных носителей и (b) – их средней кинетической энергии при разных флюенсах лазерного излучения, рассчитанных по моделям F-Pl, EMRE с учетом и без учета дисперсионного слагаемого. Длина волны $\lambda = 1.24$ мкм

($F = 1.3$ Дж/см², при $\lambda = 4.4$ мкм). Полученные оценки являются немного заниженными, поскольку при увеличении энергии свободных носителей в процессе их разогрева в лазерном поле также увеличивается частота столкновений, которая уменьшает левую часть выражения (8) и смещает область применимости модели F-Pl в сторону больших флюенсов. В силу этого, в данной работе для $\lambda = 1.24$ мкм использовались флюенсы вплоть до $F = 8$ Дж/см², а для $\lambda = 4.4$ мкм – до $F = 2$ Дж/см².

На рисунке 2 представлена динамика свободных носителей, индуцированных лазерным излучением с длиной волны 1.24 мкм, с использованием модели F-Pl. Плотность распределения носителей по зоне проводимости для различных моментов времени показана на рис. 2а ($F = 2$ Дж/см²). Для более удобного сравнения кривых каждая из них была нормирована на свое максимальное значение. Первоначально узкое распределение вблизи дна зоны проводимости становится шире благодаря фотоионизации, создающей свободные носители с энергией ~ 0.51 эВ (синяя кривая), а также нагреву в лазерном поле индуцированных носителей. По мере прохождения лазерного импульса и увеличения интенсивности поля максимум плотности распределения носителей смещается в область больших энергий. Фотоионизация также создает свободные носители с большей энергией в силу эффективного уширения запрещенной зоны, происходящего из-за осцилляций валентных электронов в лазерном поле. Носители, имеющие энергию больше критической, которая для CaF₂ составляет $1.5E_g = 18$ эВ, участвуют в ударной ионизации. В результате этого существенно повышается населенность области энергии выше 18 эВ,

но, напротив, увеличивается населенность области 2.1 эВ.

На рисунке 2b показано изменение средней кинетической энергии свободных носителей при прохождении лазерного импульса. При малых флюенсах лазерного излучения ($F < 0.03$ Дж/см²) средняя кинетическая энергия носителей монотонно увеличивается, что свидетельствует о постепенном нагреве носителей в лазерном поле (наибольший рост средней кинетической энергии наблюдается в центре импульса – при наибольшей интенсивности лазерного излучения). Совершенно другая динамика наблюдается при больших флюенсах ($F > 0.3$ Дж/см²). Во-первых, плавный нагрев носителей передним фронтом импульса сменяется падением их средней кинетической энергии, вызванным активным действием ударной ионизации и переносом носителей из высокоэнергетической области (> 18 эВ) в низкоэнергетическую (около 2 эВ).

Причина этого состоит в том, что носители стали в значительной мере концентрироваться в области энергии выше критической (см. плотность распределения при $t = -100$ фс на рис. 2а). С этого момента времени полная плотность носителей в зоне проводимости нарастает лавинообразно (см. рис. 3а). В центре импульса за счет достигнувшей своего максимального значения интенсивности лазерного излучения средняя кинетическая энергия носителей продолжает увеличиваться. Небольшие скачки, заметные на рис. 2b при $F = 2$ и 7 Дж/см² обусловлены изменением порядка многофотонности процесса фотоионизации вследствие увеличения эффективной ширины запрещенной зоны при росте интенсивности лазерного излучения [22].

На заднем фронте импульса практически не происходит нагрева носителей, однако ударная ионизация продолжает свое действие, снижая среднюю кинетическую энергию носителей до значения 6.7 эВ , что составляет $0.56 E_g$. Примечательным является тот факт, что вне зависимости от флюенса лазерного излучения, если он превышает определенное значение ($F > 0.05 \text{ Дж/см}^2$), то после прохождения лазерного импульса средняя кинетическая энергия носителей принимает одно и то же значение. Расчеты, проведенные для других длительностей лазерного импульса (в пределах от 80 до 400 фс), другой длины волны (4.4 мкм), а также для модельной среды с вдвое меньшей шириной запрещенной зоны (результаты расчетов не отображены в работе) показывают, что конечное значение средней кинетической энергии остается одним и тем же ($0.56 E_g$). Данный факт свидетельствует о том, что распределение носителей в зоне проводимости после прохождения лазерного импульса имеет один и тот же вид, независимо от параметров лазерного излучения и ширины запрещенной зоны. Ключевым механизмом, формирующим распределение носителей на хвосте лазерного импульса, является ударная ионизация. Наблюдаемая особенность позволяет заключить, что достигается динамический баланс между лазерным нагревом носителей и ударной ионизацией: увеличение скорости лазерного нагрева вследствие роста флюенса лазерного излучения приводит к усилению ударной ионизации, которая формирует точно такое же распределение носителей по зоне проводимости, но лишь с увеличенной полной плотностью носителей.

С практической точки зрения, данный факт указывает на возможность без проведения расчетов динамики свободных носителей заряда, возникающей под действием лазерного импульса, использования эффективной частоты столкновений и эффективной энергии носителей (получаемых при усреднении этих величин по энергетическому распределению носителей) для анализа процессов, следующих за фотовозбуждением носителей: электрон-фононной релаксации, люминесценции.

Применение модели F-PI, например, в задаче распространения лазерного излучения требует огромных вычислительных ресурсов, поскольку необходима достаточная степень дискретизации расчетной сетки энергии носителей. Наиболее простым и логичным способом упростить расчеты является использование скоростных моделей динамики носителей. Ниже представлены результаты с использованием модели EMRE с учетом дисперсионного слагаемого (на рис. 3–5 обозначена как “EMRE with disp”) и без него

(обозначена как “EMRE w/o disp”). Заметим, что, согласно рис. 2а, плотность распределения носителей при энергии выше критической ($> 18 \text{ эВ}$) близка к экспоненциальной, что оправдывает сделанное в модели EMRE предположение о распределении носителей на усредненном уровне (см. формулу (12)).

Динамика полной плотности носителей в зоне проводимости (рис. 3а) демонстрирует небольшое отличие скоростных моделей от более точной модели F-PI: значения отличаются в 1.1 раза при $F = 0.7 \text{ Дж/см}^2$, в 1.4 раза при $F = 2 \text{ Дж/см}^2$ и в 3.1 раза при $F = 7 \text{ Дж/см}^2$. Следует отметить, что увеличение точности при учете дисперсионного слагаемого не наблюдается. Однако динамика средней кинетической энергии носителей показывает существенное количественное отличие на заднем фронте импульса (рис. 3б). Использование модели EMRE без дисперсионного слагаемого приводит к отклонению в средней кинетической энергии на 2.6 эВ , что составляет около 40 %. Учет же дисперсионного слагаемого сокращает это отличие до 0.7 эВ , что составляет всего 11 %. В некоторых практических приложениях, например, при определении энергетического порога оптического пробоя, времени релаксации импульса и энергии свободных носителей увеличение точности расчетов энергетического распределения носителей оказывается важным.

Одной из причин наблюдаемых различий в средней кинетической энергии носителей и их полной плотности в зоне проводимости, рассчитанных по модели EMRE и по модели F-PI, является грубость расчетной сетки, используемой в скоростных моделях (шаг сетки равен энергии фотона $\sim 1 \text{ эВ}$ для длины волны 1.24 мкм). Эти различия можно сократить при уменьшении шага расчетной сетки, т.е. при переходе в более длинноволновую область. Кроме того, динамика носителей под действием лазерного поля среднего инфракрасного диапазона является перспективной и интересной темой для исследований, особенно в свете создания новых перестраиваемых лазерных источников в этом диапазоне [25]. На рисунках 4а и б показана динамика полной плотности свободных носителей и их средней кинетической энергии соответственно. Действительно, отличие в плотности генерируемых свободных носителей сократилось и составляет 1.04 раза при $F = 0.2 \text{ Дж/см}^2$, 1.2 раза при $F = 0.8 \text{ Дж/см}^2$ и 1.6 раза при $F = 2 \text{ Дж/см}^2$, а средняя кинетическая энергия носителей после прохождения лазерного импульса принимает те же самые значения, что и в случае длины волны 1.24 мкм, как и было отмечено выше. При этом учет дисперсионного слагаемого позволяет заметно снизить отличие

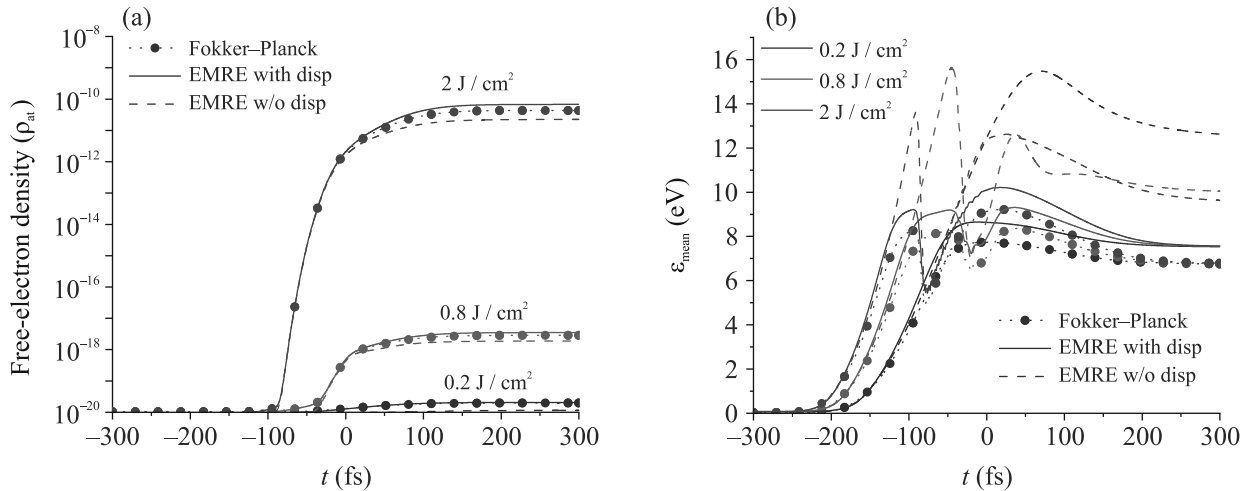


Рис. 4. (Цветной онлайн) Динамика: (а) – полной плотности свободных носителей и (б) – их средней кинетической энергии при разных флюенсах лазерного излучения, рассчитанных по моделям F-P1, EMRE с учетом и без учета дисперсионного слагаемого. Длина волны $\lambda = 4.4$ мкм

между EMRE и моделью F-P1 только для динамики средней кинетической энергии носителей.

С точки зрения дальнейшего применения моделей динамики свободных носителей в задаче распространения лазерного излучения через среду, наиболее привлекательной является модель EMRE с добавленным дисперсионным слагаемым. Во-первых, точность расчетов с помощью этой модели позволяет использовать ее взамен статистических моделей (например, F-P1). Во-вторых, что не менее важно, длительность проводимых с ее помощью расчетов примерно в 20 раз меньше, чем при использовании модели F-P1 (рис. 5). При этом коэффициент ускорения остается практически неизменным во всем диапазоне анализируемых флюенсов лазерного излучения.

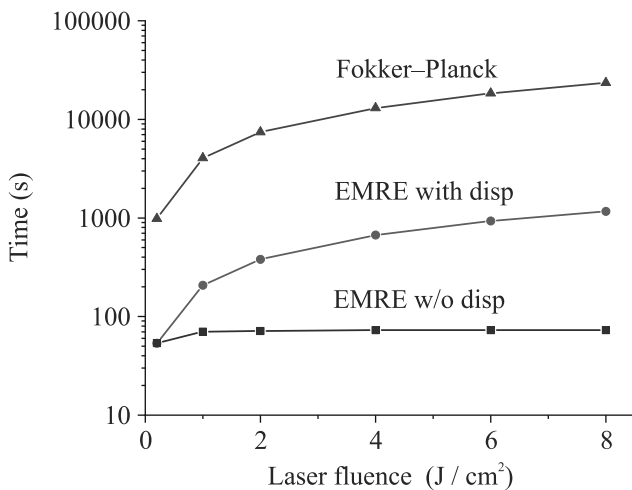


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сравнение длительности проводимых расчетов динамики свободных носителей для разных моделей

Закключение. В работе проведено исследование динамики свободных носителей в CaF_2 , индуцированных мощным фемтосекундным лазерным излучением ближнего (1.24 мкм) и среднего (4.4 мкм) инфракрасного диапазонов. Проведено сравнение ранее разработанной модели EMRE с моделью, основанной на уравнении Фоккера–Планка. При флюенсах лазерного излучения, достаточных для активного действия ударной ионизации ($F > 0.3$ Дж/см² для длины волны $\lambda = 1.24$ мкм и $F > 0.1$ Дж/см² для $\lambda = 4.4$ мкм) возникает сложная динамика средней кинетической энергии носителей, определяемая скоростью нагрева носителей (пропорциональна интенсивности лазерного излучения) и ударной ионизации (пропорциональна плотности носителей с энергией выше критической). В частности, в центре лазерного импульса, средняя кинетическая энергия носителей может достигать значений порядка E_g , тогда как после прохождения лазерного импульса средняя кинетическая энергия принимает значение $0.56E_g$. Данное значение не зависит от параметров лазерного излучения (флюенса, длины волны в пределах от 1.24 до 4.4 мкм, длительности в пределах от 80 до 400 фс), что свидетельствует о формировании после прохождения импульса независимой от этих параметров формы функции распределения носителей в зоне проводимости. К похожему результату – неизменности формы функции распределения носителей при прохождении лазерного импульса, но в случае, если возникло лавинообразное увеличение плотности носителей – пришли также в работе [16].

Добавление к модели EMRE дисперсионного слагаемого не приводит к существенному уменьшению

расхождения в полной плотности носителей в зоне проводимости, полученных в рамках моделей EMRE и F-P1 (отличие составляет не более чем 3 раза для $\lambda = 1.24$ мкм и 1.6 раза для $\lambda = 4.4$ мкм). Однако это дополнительное слагаемое позволяет уменьшить на 30 % (для $\lambda = 1.24$ мкм) расхождение в средней кинетической энергии. Средняя кинетическая энергия отражает распределение носителей по зоне проводимости, от которого зависит эффективная частота столкновения носителей с частицами (электронами и ионными остовами) и квазичастицами (фононами). Поэтому учет дисперсионного слагаемого важен в таких практических приложениях, как определение энергетического порога оптического пробоя и времени релаксации импульса и энергии свободных носителей.

Применение скоростных моделей (EMRE) вместо более сложных и требующих больших временных ресурсов статистических моделей (F-P1) становится оправдано при решении более масштабной задачи – распространения лазерного излучения через материал. Как показано в данной работе, использование модели EMRE с дисперсионным слагаемым позволяет проводить расчеты в 20 раз быстрее.

Увеличение флюенса лазерного излучения выше тех значений, что представлены в данной работе, будет приводить к истощению валентной зоны и полной однократной ионизации материала. Увеличение длины волны лазерного излучения снижает максимальное значение интенсивности, при котором модель F-P1 применима. В этих режимах (большой флюенс и большая длина волны) применение представленных в данной работе моделей динамики свободных носителей представляется невозможным и требуется решение более общего уравнения Больцмана [13, 14].

Следует подчеркнуть, что в данной работе не брались во внимание любые другие процессы передачи импульса и энергии между частицами и квазичастицами, кроме фотоионизации, нагрева носителей в лазерном поле в результате электрон-электронных и электрон-нейтральных столкновений, а также ударной ионизации. Однако при исследовании механизмов передачи лазерной энергии кристаллической решетке и динамики этих процессов требуется также учет электрон-фоонных столкновений и релаксации импульса и энергии свободных носителей вследствие них [16, 21].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 19-29-12030). К. В. Львов является стипен-

диатом Фонда развития теоретической физики и математики “Базис”.

1. S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, U. B. Szafruga, P. Agostini, L. F. DiMauro, and D. A. Reis, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 167407 (2011).
2. E. Goulielmakis and T. Brabec, *Nature Photon.* **16**, 411 (2022).
3. V. V. Strelkov, V. T. Platonenko, A. F. Sterzhantov, and M. Yu. Ryabikin, *Phys.-Uspekhi* **59**, 425 (2016).
4. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Langer, B. Urbanek, C. Lange, U. Huttner, D. Golde, T. Meier, M. Kira, S. W. Koch, and R. Huber, *Nature Photon.* **8**, 119 (2014).
5. N. Sanner, O. Utéza, B. Bussiere, G. Coustillier, A. Leray, T. Itina, and M. Sentis, *Appl. Phys. A* **94**, 889 (2009).
6. M. Lenzner, *Int. J. Modern Phys. B* **13**, 1559 (1999).
7. E. I. Mareev, B. V. Rumyantsev, and F. V. Potemkin, *JETP Lett.* **112**, 780 (2020).
8. C. B. Schaffer, A. Brodeur, and E. Mazur, *Meas. Sci. Technol.* **12**, 1784 (2001).
9. S. Yu. Stremoukhov, A. V. Andreev, and O. A. Shoutova, *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **80**, 500 (2016).
10. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **84**, 5 (2020).
11. E. Mareev, A. Pushkin, E. Migal, K. Lvov, S. Stremoukhov, and F. Potemkin, *Sci. Rep.* **12**, 7517 (2022).
12. E. M. Gershenzon, M. E. Gershenzon, G. N. Gol'tsman, A. M. Lyul'kin, A. D. Sernenov, and A. V. Sergeev, *JETP Lett.* **46**, 226 (1987).
13. A. S. Epifanov, A. A. Manenkov, and A. M. Prokhorov, *JETP* **70**, 728 (1976).
14. A. Kaiser, B. Rethfeld, M. Vicanek, and G. Simon, *Phys. Rev. B* **61**, 437 (2000).
15. L. H. Holway, *J. Appl. Phys.* **45**, 677 (1974).
16. B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, *Phys. Rev. B* **53**, 1749 (1996).
17. B. C. Stuart, M. D. Feit, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2248 (1995).
18. B. Rethfeld, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 18740 (2004).
19. K. V. Lvov, F. V. Potemkin, and S. Yu. Stremoukhov, *Materials Today Communications* **35**, 105594 (2023).
20. L. V. Keldysh, *JETP* **10**, 509 (1960).
21. N. Medvedev and B. Rethfeld, *J. Appl. Phys.* **108**, 103112 (2010).
22. L. V. Keldysh, *JETP* **47**, 1945 (1964).
23. M. Gryziński, *Phys. Rev.* **138**, A336 (1965).
24. P. Balling and J. Schou, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 036502 (2013).
25. E. Migal, A. Pushkin, B. Bravy, V. Gordienko, N. Minaev, A. Sirotkin, and F. Potemkin, *Opt. Lett.* **44**, 2550 (2019).

Энергетический спектр валентной зоны в квантовых ямах HgTe на пути от 2D к 3D топологическому изолятору

Г. М. Миньков⁺¹⁾, О. Э. Рут⁺, А. А. Шерстобитов⁺⁺, С. А. Дворецкий^{×°}, Н. Н. Михайлов^{×°},
В. Я. Алешкин[▽]

⁺Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, 620000 Екатеринбург, Россия

^{*}Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620137 Екатеринбург, Россия

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

[°]Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[▽]Институт физики микроструктур РАН, 603087 д. Афонино, Нижегородская обл., Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2023 г.

После переработки 6 мая 2023 г.

Принята к публикации 6 мая 2023 г.

Для определения параметров энергетического спектра валентной зоны в квантовых ямах (QW) HgTe шириной (d_{QW}) 20–200 нм измерены магнитоупорядоченные и температурные зависимости сопротивления и эффекта Холла. Сопоставление концентрации дырок, определенных из периода осцилляций Шубникова–де Гааза (SdH), и эффекта Холла показывает, что во всем диапазоне d_{QW} кратность вырождения состояний потолка валентной зоны равна 2, а циклотронная масса, m_h , определенная из температурной зависимости амплитуды осцилляций SdH, монотонно возрастает от $0.2m_0$ до $0.3m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) с ростом концентрации дырок, p , от $2 \cdot 10^{11}$ до $6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Проведено сопоставление с теоретическими зависимостями $m_h(p, d_{QW})$, рассчитанными в рамках 4-х зонной kP -модели. Эти расчеты предсказывают скачкообразный рост m_h примерно в 2 раза за счет попарного слияния боковых экстремумов при увеличении концентрации дырок, который при $d_{QW} = 20 \text{ нм}$ должен наблюдаться при $p = (4\text{--}4.5) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и при $p = 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ в QW 200 нм. Это предсказание радикально отличается от экспериментальных зависимостей. Показано, что учет дополнительных факторов (электрическое поле в QW, величина деформации) не снимает противоречия между экспериментом и теорией. Это вызывает сомнения в том, что используемые kP расчеты адекватно описывают валентную зону при всех d_{QW} .

DOI: 10.31857/S1234567823120078, EDN: ewbpkj

1. Введение. Структуры с квантовыми ямами HgTe привлекают большое внимание по многим причинам: 1) QW формируется из бесщелевого полупроводника, а барьеры (HgCdTe) формируются из полупроводника с нормальным зонным упорядочением²⁾; 2) зонный спектр родительских материалов HgTe, HgCdTe детально изучен и их параметры хорошо известны; 3) расчеты энергетического спектра $E(k)$ в квантовых ямах на основе HgTe в рамках многозонного kP -метода хорошо развиты (см., например, [1–4] и ссылки в них). Они показывают, что в зависимости от ширины квантовой ямы d_{QW} ре-

лизуются самые разные типы энергетического спектра: от спектра, подобного спектру узкозонного полупроводника при d_{QW} меньше 6.3 нм, до полуметаллического при d_{QW} больше $\approx 15 \text{ нм}$; 4) теория предсказывает, что при $d_{QW} > 6.5 \text{ нм}$ QW HgTe является двумерным топологическим изолятором, когда наряду с двумерными состояниями формируются одномерные краевые состояния. А при d_{QW} больше 60–80 нм, она является трехмерным топологическим изолятором, когда образуются двумерные односпиновые поверхностные состояния с характерной длиной локализации в z -направлении много меньше, чем d_{QW} (z – направление, перпендикулярное плоскости QW); 5) технология выращивания структур HgCdTe/HgTe/HgCdTe хорошо разработана [5, 6].

Казалось бы, все это позволяет детально понять все свойства (транспортные, оптические и т.д.) структур HgCdTe/HgTe/HgCdTe.

¹⁾e-mail: Grigori.minkov@urfu.ru

²⁾Нормальным порядком зон в точке Γ в полупроводниках A_2B_6 является дважды вырожденный терм Γ_6 – зона проводимости, четырехкратно вырожденный терм Γ_8 образует валентную зону, состоящую из зон тяжелых и легких дырок и дважды вырожденный терм Γ_7 – спин-орбитально отщепленная валентная зона.

Теоретические расчеты предсказывают, что зона проводимости довольно простая – она близка к изотропной и непараболической. Ее спектр достаточно подробно изучен в структурах с $d_{\text{QW}} = (4-80)$ нм различными методами: оптическими, фотоэлектрическими в широком диапазоне энергий квантов, начиная с ТГц, магнитотранспортными [8–12]. Было показано, что в основном энергетический спектр разумно описывается в рамках 4-х зонной $\mathbf{kP}$ -модели, а некоторые несоответствия теории с экспериментом обсуждались в [13].

Энергетический спектр валентной зоны значительно сложнее. Теория предсказывает, что при $d_{\text{QW}} < 7-7.5$ нм потолок валентной зоны расположен при $\mathbf{k} = 0$ и имеет кривизну (массу) близкую к кривизне зоны проводимости. При $d_{\text{QW}} > 7-7.5$ нм потолок валентной зоны формируется четырьмя боковыми экстремумами, так что в симметричных ямах кратность вырождения состояний потолка зоны $K = 8$ (2 за счет “спина”, 4 – количество боковых экстремумов). Вблизи экстремумов их анизотропия невелика и при $p < (5-9) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ циклотронная масса дырок, $m_h = (\hbar^2/\pi)dS/dE$, где S – площадь изоэнергетического сечения при энергии E , составляет $(0.2-0.3)m_0$.

Учет отсутствия инверсионной симметрии в структурах HgCdTe/HgTe/HgCdTe за счет асимметрии границ (*interface inversion asymmetry*, ИА), который в рамках 4-х зонной $\mathbf{kP}$ -модели описывается одним параметром $g4$ [14], приводит к “спиновому” расщеплению состояний потолка валентной зоны, так что кратность вырождения уменьшается до 4-х. На рисунке 1 приведены изоэнергетические контуры верхнего отщепленного состояния, рассчитанные с учетом ИА в QW 8.3 нм с параметром $g4 = 0.8$. Этот рисунок показывает, что при уменьшении энергии (т.е. с ростом концентрации) до (18–18.5) мэВ изоэнергетические контуры двух приведенных на рисунке экстремумов сливаются, что должно приводить к удвоению циклотронной массы, m_h за счет удвоения dS/dE .

Экспериментально энергетический спектр валентной зоны в целом изучен значительно меньше [15–17]. Было показано, что при $d_{\text{QW}} (5-7)$ нм, когда экстремум валентной зоны находится при $\mathbf{k} = 0$, он сильно расщеплен за счет ИА [15, 17].

При $d > (7-7.5)$ нм, когда потолок валентной зоны формируется четырьмя латеральными экстремумами, энергетический спектр экспериментально изучен существенно меньше. В работе [18] было показано, что в QW с $d_{\text{QW}} = (8-20)$ нм при $p = (2-5) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, эффективная масса близка к теоретиче-

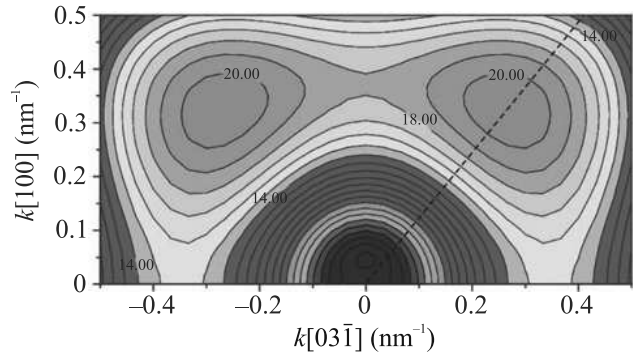


Рис. 1. (Цветной онлайн) Изоэнергетические контуры верхнего отщепленного состояния, рассчитанные с учетом ИА. Изоэнергетические контуры нижнего отщепленного состояния подобны и расположены примерно на 6 мэВ ниже по энергии. Ориентация подложки (013), ширина QW 8.3 нм, $g4 = 0.8$. Приведена половина картинка, вторая часть – зеркальное отображение. Энергия отсчитывается от $E(k = 0)$. Шаг 1 мэВ. Энергии для некоторых контуров показаны на графике. Пунктирная линия показывает направление, которое проходит через максимум $E(k)$

ской, но кратность вырождения, $K = 2$, а не 4, как должно быть с учетом ИА в симметричной яме. Было показано, что учет дополнительной асимметрии (например, различная ширины гетерограниц, или различные значения параметра, учитывающего вклад ИА на левой и правой стенках, $g4L$ и $g4R$, соответственно) приводит к 2-х кратному уменьшению K и, таким образом, позволяет снять это расхождение с теорией.

Экспериментальные исследования циклотронной массы дырок в QW с $d_{\text{QW}} = 8-20$ нм в диапазоне концентраций $p = (2-5) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, показали, что эффективная масса близка к теоретической [17]. Результаты этой работы приведены на рис. 2.

Сколько-нибудь детальные экспериментальные результаты при $d_{\text{QW}} > 20$ нм отсутствуют.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований эффективной массы дырок и кратности вырождения потолка валентной зоны в QW с $d_{\text{QW}} = (20-200)$ нм в диапазоне концентраций дырок $(2-6) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

2. Экспериментальные результаты и обсуждение. Исследованные структуры $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{HgTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.6-0.7$) были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs с ориентацией (013) с ширинами квантовых ям $d_{\text{QW}} = 22, 32, 46, 80, 88, 120, 200$ нм (кроме того, одна из структур с $d_{\text{QW}} = 80$ нм была выращена

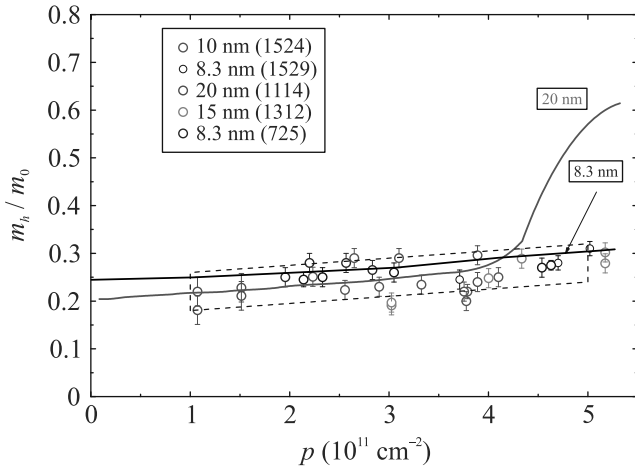


Рис. 2. (Цветной онлайн) Значения циклотронной массы дырок при различных концентрациях в структурах с d_{QW} от 8.3 до 20 нм (из работы [18]). Кривые – зависимости m_h/m_0 , рассчитанные для d_{QW} 8.3 и 20 нм при значении $g4L = 0.8$, $g4R = 1$. Штриховой четырехугольник показывает область значений m_h/m_0 , в которой лежат все экспериментальные результаты

на подложке (100)). Измерения проводились на холловских мостиках с шириной канала 0.5 мм и расстоянием между потенциальными контактами 0.5 мм. После нанесения на поверхность мостиков подзатворного диэлектрика (парилена), в качестве затвора напылялся алюминий. Измерения проводились на постоянном токе, в линейном режиме, в диапазоне температур (1.3–4) К, в магнитных полях, B , до 5 Тл.

Экспериментальные результаты и их обработка одинакова для всех структур, исследованных в этой работе. Мы подробно рассмотрим их на примере структуры 180824 с $d_{QW} = 32$ нм.

Зависимости продольного сопротивления, R_{xx} , и коэффициента Холла, R_H , от магнитного поля, приведенные на рис. 3а, показывают, что в транспорте принимают участие по крайней мере 2 типа носителей: электроны, которые определяют зависимости R_{xx} и R_H от магнитного поля в малых магнитных полях, $B < 0.3$ – 0.5 Тл (аналогичные зависимости наблюдаются при всех $V_g < 0$). При $V_g > 0$ дырочный вклад в проводимость исчезает и R_{xx} , R_H определяются только электронами зоны проводимости. Это является следствием того, что при $d_{QW} > 14$ – 15 нм квантовая яма HgTe является полуметаллом: дно зоны проводимости, которое находится в центре зоны Бриллюэна, при $\mathbf{k} = 0$, расположено ниже по энергии, чем боковые экстремумы валентной зоны (вставка на рис. 3а). Зависимость концентрации дырок и

электронов от V_g приведена на рис. 3б. Концентрация электронов при $V_g < 0$ определялась из анализа зависимостей R_{xx} и R_H от магнитного поля в интервале $0.03 < B < 0.6$ Тл в модели проводимости двумя типами носителей, а при $V_g > 0$ из эффекта Холла при $B = 0.03$ Тл, $n = 1/eR_H$.

Концентрация дырок определялась как из анализа зависимостей R_{xx} и R_H от магнитного поля в интервале $0.05 < B < 1$ Тл в модели проводимости двумя типами носителей, так и из частоты (F) осциллирующей SdH, $p_{SdH} = (e/h)F \cdot K$ (рис. 4а). Рисунок 3б показывает, что при $K = 2$, p_{SdH} в пределах экспериментальной ошибки совпадает с холловской концентрацией дырок³⁾.

Рисунок 3б показывает также, что зависимость заряда квантовой ямы от V_g линейна во всем диапазоне V_g , что свидетельствует об отсутствии неучтенных каналов проводимости. Этот вывод подтверждается тем, что наклон зависимости $Q/(e \cdot V_g)$ в пределах ошибки совпадает с C/S_g , где C – емкость между 2D-газом и затвором, S_g – площадь затвора.

Для примера рассмотрим осцилляции $R_{xx}(B)$ в дырочной области при $V_g = -4$ В, приведенные на рис. 3а. Спектр Фурье осциллирующей части R_{xx} ($\delta R_{xx} = (R_{xx} - R^{\text{мон}})/R^{\text{мон}}$, где $R^{\text{мон}}$ – монотонная часть магнитосопротивления) при $V_g = -4$ В приведен на рис. 4а. Низкочастотная компонента спектра соответствует вкладу электронов в осцилляции $R_{xx}(B)$, а высокочастотная – вкладу дырок. Это сразу следует из температурной зависимости амплитуды этих компонент (рис. 4а). При увеличении T от 1.32 до 2.4 К амплитуда низкочастотной компоненты уменьшается всего лишь на 20 % (это соответствует малой эффективной массе электронов), а амплитуда высокочастотной примерно в 5 раз.

Первый вывод, который можно сделать из рис. 3б и 4а, заключается в том, что кратность вырождения уровней Ландау в валентной зоне равна 2. Это следует из того, что концентрация дырок, определенная из периода высокочастотных осцилляций, считая, что уровни Ландау 2-хкратно вырождены, в пределах ошибки совпадает с холловской концентрацией.

Для определения эффективной массы дырок по температурной зависимости амплитуды осцилляций, Ampl , эти осцилляции были восстановлены обратным Фурье преобразованием отфильтрованного (как показано штриховой линией на рис. 4а) спектра Фу-

³⁾ Эта работа посвящена изучению спектра валентной зоны, поэтому здесь мы не будем обсуждать поведение R_{xx} и R_H в электронной области. Подробный анализ для этой структуры в электронной области приведен в работе [18].

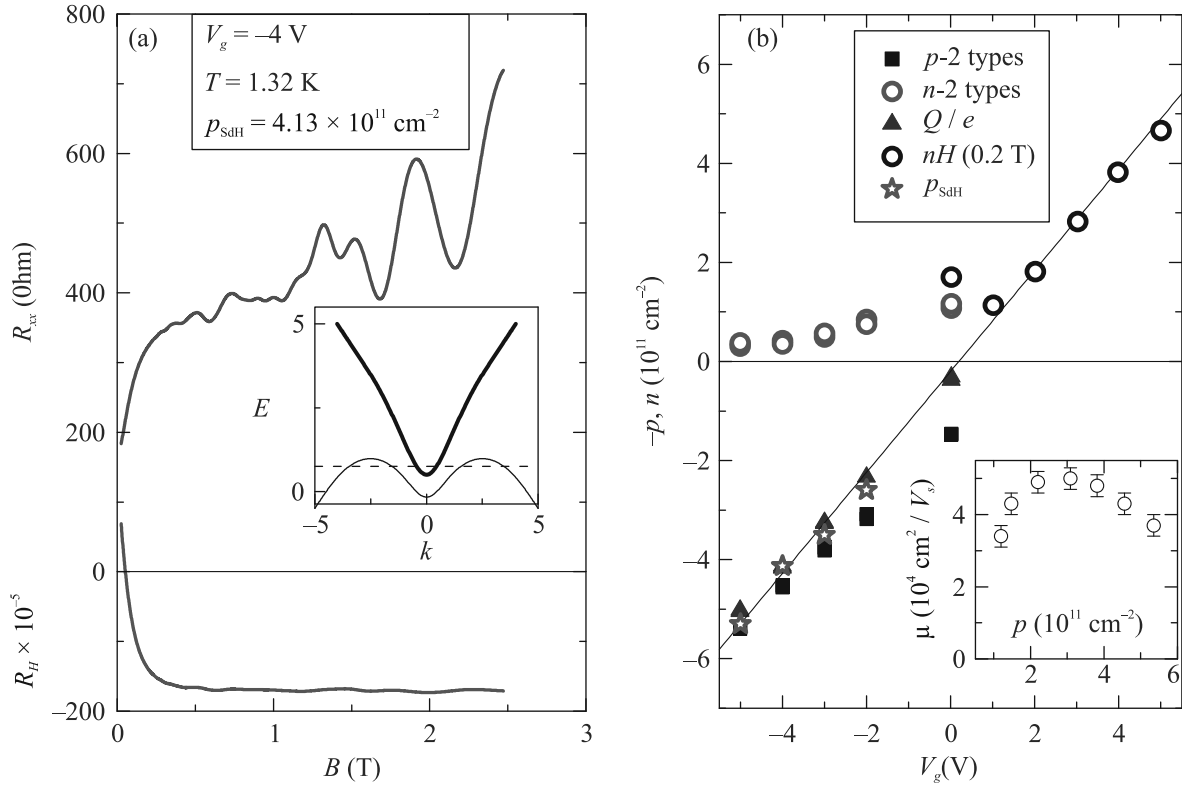


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости R_{xx} и R_H , от магнитного поля. На вставке – эскиз $E_c(k)$, $E_v(k)$ при $d_{QW} > 14$ нм. (б) – Зависимости концентраций дырок, p , и электронов, n , от V_g , найденных в модели проводимости двумя типами носителей при напряжении затвора $V_g < 0$, и p , определенной из периода осцилляций SdH, в предположении 2-х кратного вырождения уровней Ландау, и зависимость заряда ямы $Q/e = -p + n$ от V_g , где e – заряд электрона. На вставке – зависимость подвижности дырок от их концентрации

рье (рис. 4b). На рисунке 4с точками показаны значения Ampl для нескольких температур в магнитном поле 1.5 Тл. Приведенная на этом рисунке кривая, соответствует формуле Лифшица–Косевича, дающая наилучшее согласие с экспериментальными результатами. Оно достигается при $m_h/m_0 = 0.22$. Для оценки ошибки величина m_h/m_0 определялась при различных магнитных полях. Эти результаты приведены на рис. 4d. Таким образом, при $p = 4.05 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $m_h/m_0 = 0.22 \pm 0.03$. Такие измерения и анализ были проведены во всем доступном интервале концентраций и эти результаты приведены на рис. 5 вместе с рассчитанной зависимостью $m_h(p)/m_0$.

Видно, что при концентрации дырок меньше $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ m_h/m_0 хорошо согласуется как с результатами при $d_{QW} = 8-20$ нм (рис. 2), так и с теоретической зависимостью. Но резкого роста m_h/m_0 , связанного с попарным слиянием боковых экстремумов, не наблюдается.

Рассчитанные зависимости m_h/m_0 от концентрации дырок, при некоторых d_{QW} , в диапазоне (20–200) нм приведены на рис. 6. На этом рисунке мы

привели экспериментальные результаты m_h/m_0 , полученные лишь в структурах с $d_{QW} = 200$ нм. Экспериментальные значения m_h/m_0 в структурах с $d_{QW} = 22, 32, 46, 60, 88, 120$ нм попадают в штриховой четырехугольник (экспериментальные значения мы не привели, потому что их слишком много и понять, к какой структуре относятся те или другие символы, очень трудно).

Видно, что концентрация дырок, при которой происходит скачок m_h/m_0 , связанный с попарным слиянием боковых экстремумов, очень сильно должен уменьшаться с ростом d_{QW} и при $d_{QW} = 200$ нм такой скачок должен наблюдаться при $p = 0.4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Однако экспериментальные значения m_h/m_0 при всех d_{QW} близки друг к другу и плавно возрастают от (0.2 ± 0.03) при $p = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ до (0.3 ± 0.03) при $p = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Можно подумать, что m_h/m_0 сильно зависит от ориентации QW. Мы имели возможность проверить это для QW с $d_{QW} = 80$ нм, которые мы имели с двумя ориентациями подложки – (013) и (100). Экспериментальные значения m_h/m_0 при различных концен-

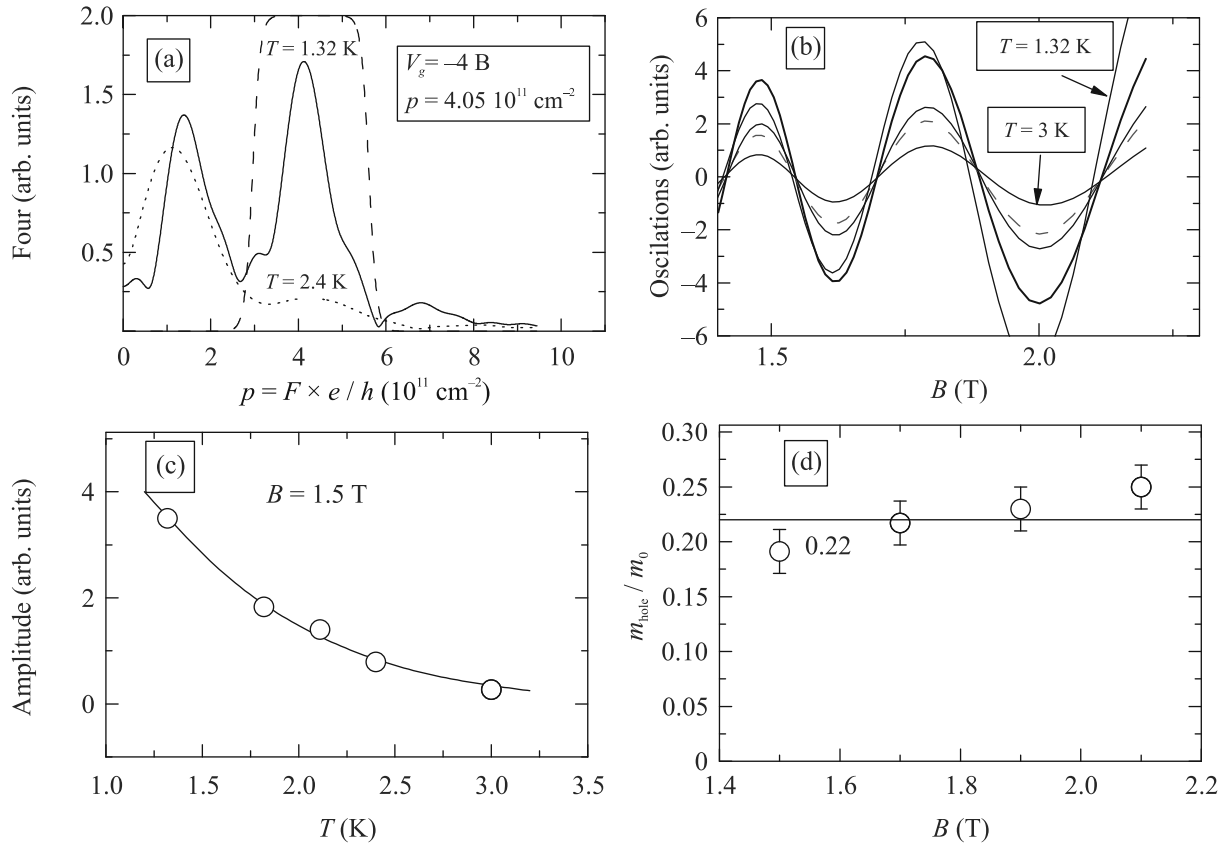


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Спектр Фурье осцилляций R_{xx} , приведенных на рис. 3а; штриховой линией показан фильтр, для выделения вклада дырок в осцилляции R_{xx} . (b) – Осцилляции SdH дырок, найденные после фильтрации спектра Фурье, как показано на рис. 4а. (c) – Точки – амплитуда SdH осцилляций при различных температурах в поле 1.5 Тл. Кривая соответствует формуле Лифшица–Косевича с $m_h/m_0 = 0.22$. (d) – Значения m_h/m_0 , определенные при различных значениях B

трациях, приведенные на вставке рис. 6, показывают, что $m_h(p)/m_0$ в пределах экспериментальной ошибки от ориентации не зависит.

Таким образом, во всем диапазоне d_{QW} от 8 до 200 нм, при концентрациях дырок $(1.5\text{--}5.5) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ кратность вырождения состояний вблизи потолка валентной зоны равна 2. Эффективная масса дырок при всех d_{QW} монотонно возрастает с ростом их концентрации с $m_h/m_0 = (0.2 \pm 0.03)$ до (0.3 ± 0.03) . Такое поведение разительно отличается от теоретического расчета спектра в рамках 4-х зонной $\mathbf{kP}$ -модели, которым предсказывается скачкообразное (примерно в 2 раза) увеличение m_h/m_0 при концентрации дырок $(4\text{--}4.5) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ в QW 20 нм и при концентрации дырок $0.4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ в QW 200 нм.

С чем могло бы быть связано такое отличие? 1) В эксперименте концентрация дырок изменялась напряжением затвора, т.е. при наличии электрического поля в яме (E_z), а расчет сделан для “пустого” спектра. Для более строгих самосогласованных расчетов

необходимо знать распределение заряда дырок по z , т.е. необходимо знать волновые функции при энергиях меньше энергии Ферми, при всех значениях k_x, k_y . Эта задача представляется слишком сложной и для оценки роли электрического поля в яме мы ограничимся рассмотрением влияния $E_z = \text{const}$). Результаты расчета зависимости m_h/m_0 от концентрации дырок при $E_z = 5 \cdot 10^2$ В/см, приведенные на рис. 7, показывают, что двукратно вырожденные состояния потолка валентной зоны расщепляются и скачок массы в одной ветви сдвигается в сторону меньших концентраций, а в другой – в сторону больших. В поле $5 \cdot 10^2$ В/см при $p < 2.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ заполнено лишь одно верхнее состояние, так что кратность вырождения в этом диапазоне должна быть равна 1, а $m_h/m_0 \approx 0.17$. При $2.5 \cdot 10^{10} < p < 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ заполнены оба: верхнее и нижнее (обозначенные на рис. 7 как upper and bottom) состояния, так что кратность вырождения должна быть равна 2, а $m_h/m_0 \approx (0.17\text{--}0.18)$. При $5 \cdot 10^{10} < p < 1.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ за-

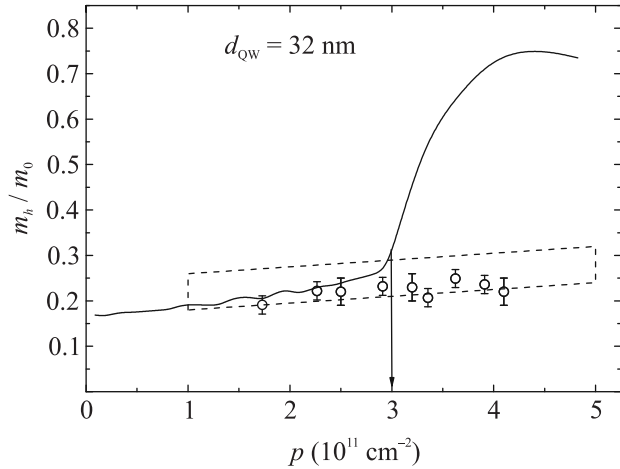


Рис. 5. Точки – масса дырок при различных концентрациях при $d_{QW} = 32$ нм. Кривая – рассчитанная зависимость m_h/m_0 . Стрелка показывает концентрацию дырок, при которой должны попарно сливаться боковые экстремумы, что приводит к резкому росту m_h/m_0 . Штриховой четырехугольник тот же, что на рис. 2. Он показывает область значений m_h/m_0 , в которой лежат все экспериментальные результаты при $8 < d_{QW} < 20$ нм [18]

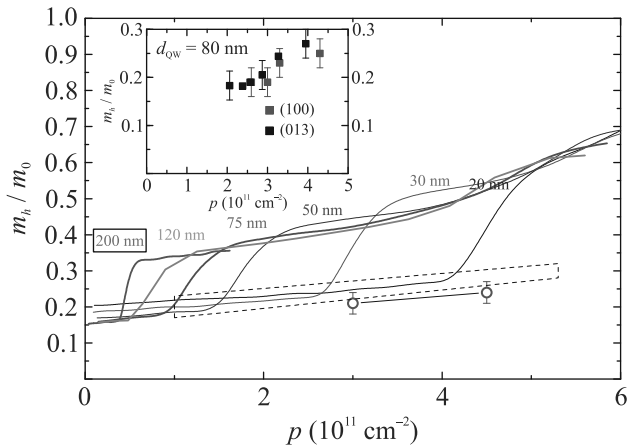


Рис. 6. (Цветной онлайн) Кривые – рассчитанные зависимости $m_h(p)/m_0$ при некоторых d_{QW} . Точки – экспериментальные значения для самой большой $d_{QW} = 200$ нм. Штриховой четырехугольник тот же, что на рис. 2 и 5. Он показывает область значений m_h/m_0 , в которой лежат все экспериментальные результаты при $8 < d_{QW} < 20$ нм (рис. 2) и при $d_{QW} = 22, 32, 46, 60, 88, 120$ нм. На вставке приведены экспериментальные значения m_h/m_0 для двух структур с $d_{QW} = 80$ нм с ориентациями подложки (013) и (100)

полнено верхнее состояние, масса в котором стала $m_h/m_0 \approx 0.36$ и нижнее с массой $m_h/m_0 \approx 0.18$. А при $p > 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ заполнены оба состояния с близкими массами $m_h/m_0 \approx (0.35-0.38)$. Таким

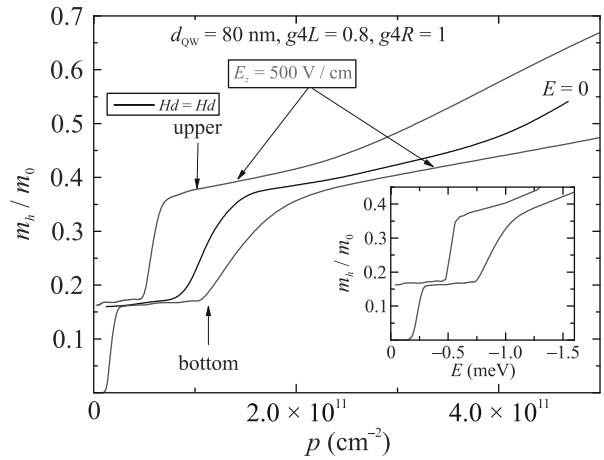


Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимости m_h/m_0 от концентрации в каждой из расщепленных электрическим полем E_z ветвях спектра (upper and bottom). На вставке – зависимости m_h/m_0 от энергии, отсчитанной от потолка валентной зоны, при различных значениях электрического поля E_z

образом, теория предсказывает, что в структуре с $d_{QW} 80$ нм при наличии электрического поля E_z , с ростом концентрации дырок должна изменяться как кратность вырождения, так и величина эффективной массы. Но при $p > 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ как и в отсутствие поля, кратность вырождения должна быть равна 2, а $m_h/m_0 \approx 0.4-0.45$.

Такое поведение m_h/m_0 не наблюдается – m_h/m_0 во всем интервале концентраций остается в интервале 0.2–0.3. Таким образом, расхождение теории с экспериментом не связано с тем, что на рис. 6 приведены результаты несамосогласованных расчетов.

2) Во всех расчетах мы полагали, что деформация в квантовой яме остается такой же, как в узких ямах. Но в широких ямах она может частично сниматься. Чтобы оценить роль этого фактора мы рассчитали зависимость $m_h(p)/m_0$ при двух значениях добавки к гамильтониану, H_p , учитывающей вклад деформации: H_p , соответствующей полной деформации (узкие ямы) и $0.5 H_p$ (рис. 8).

Видно, что концентрация, при которой должен наблюдаться скачок m_h/m_0 , практически не зависит от деформации.

Таким образом, причины разительного отличия зависимостей $m_h(p)/m_0$ от теоретических остается не известными. Это вызывает сомнения в том, что используемые kP расчеты адекватно описывают валентную зону при всех d_{QW} .

Следует отметить, что прямых экспериментальных свидетельств (доказательств) существования четырех достаточно высоких боковых экстремумов нет.

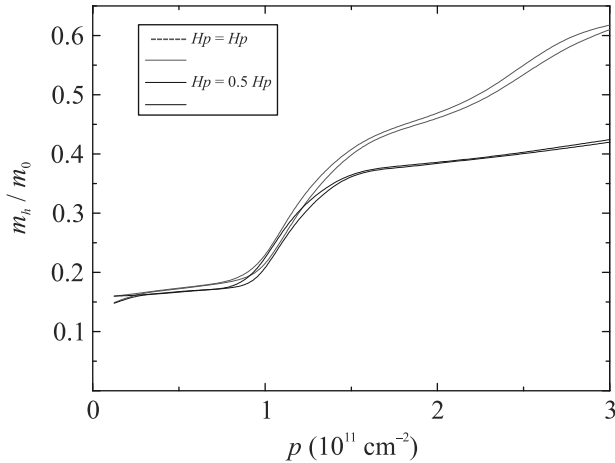


Рис. 8. (Цветной онлайн) Зависимость $m_h(p)/m_0$ при двух значениях добавки к гамильтониану, описывающему вклад деформации H_p и $0.5 H_p$

То, что при $d_{QW} < 20$ нм и $p < 4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ удается согласовать эксперимент с теорией, таким доказательством не является.

В заключение, исследования энергетического спектра потолка валентной зоны в квантовых ямах HgTe шириной от 8 до 200 нм показывают, что при концентрации дырок $p < 6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, кратность вырождения состояний потолка валентной зоны равна 2, циклотронная масса дырок монотонно возрастает с ростом концентрации от $1.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $5.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, с m_h от $0.2m_0$ до $0.3m_0$. Сопоставление с проведенными в рамках 4-х зонной kP -модели расчетами $m_h(p)/m_0$, показывает разительное отличие от экспериментальных зависимостей $m_h(p)/m_0$. Проведенные оценки роли электрического поля E_z в яме и роли деформации не могут объяснить отличия экспериментальных результатов от теоретических.

Причины такого отличия остаются неясными.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. L. G. Gerchikov and A. Subashiev, Phys. Status Solidi b **160**, 443 (1990).
2. X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C. R. Becker, and G. Landwehr, Phys. Rev. B **63**, 245305 (2001).

3. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **72**, 035321 (2005).
4. Y. Ren, Z. Qiao, and Q. Niu, Rep. Progr. Phys. **79**(6), 066501 (2016); doi: 10.1088/0034-4885/79/6/066501.
5. C. R. Becker, V. Latussek, G. Landwehr, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **68**, 035202 (2003).
6. S. Dvoretzky, N. Mikhailov, Yu. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, and S. Ganichev, ElectronicMaterials **39**, 918 (2010).
7. G. Landwehr, J. Gerschütz, S. Oehling, A. Pfeuffer-Jeschke, V. Latussek, and C. R. Becker, Physica E **6**, 713 (2000).
8. X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, C. R. Becker, and G. Landwehr, Phys. Rev. B **65**, 045324 (2002).
9. K. Ortner, X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, C. R. Becker, G. Landwehr, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **66**, 075322 (2002).
10. Z. D. Kvon, E. B. Olshanetsky, E. G. Novik, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, I. O. Parm, and S. A. Dvoretzky, Phys. Rev. B **83**, 193304 (2011).
11. X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C. R. Becker, and G. Landwehr, Phys. Rev. B **63**, 245305 (2001).
12. M. S. Zholudev, A. V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K. V. Maremyanin, K. E. Spirin, V. I. Gavrilenko, W. Knap, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mihailov, Nanoscale Res. Lett. **7**, 534 (2012).
13. G. M. Minkov, V. Ya. Aleshkin, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, A. V. Germanenko, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, Physica E **116**, 113742 (2020).
14. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science International, Harrow, UK (2005), p. 427.
15. З. Д. Квон, М. Л. Савченко, Д. А. Козлов, Е. Б. Ольшанецкий, А. С. Ярошевич, Н. Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **112**(3), 174 (2020).
16. А. Ю. Кунцевич, Е. В. Тупиков, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, М. Резников, Письма в ЖЭТФ **111**(11), 750 (2020).
17. G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, M. O. Nestoklon, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, Phys. Rev. B **93**, 155304 (2016).
18. G. M. Minkov, V. Ya. Aleshkin, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, A. V. Germanenko, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, Phys. Rev. B **96**, 035310 (2017).

Фотоусиление экситонного упорядочения в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером

Ю. С. Орлов^{+*1)}, С. В. Николаев⁺*, С. Г. Овчинников⁺*

⁺ Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

^{*} Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр” Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 мая 2023 г.

После переработки 12 мая 2023 г.

Принята к публикации 18 мая 2023 г.

Продemonстрирован новый механизм фотоусиления (индуцирования) экситонного упорядочения в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером, обусловленный возникновением массивной моды в спектре коллективных возбуждений.

DOI: 10.31857/S123456782312008X, EDN: ewezob

1. Введение. Изучение неравновесной динамики сильно коррелированных систем может дать новые знания в понимании их свойств и новые способы управления различными упорядоченными состояниями, возникающими в результате фазовых переходов. Например, сейчас широко изучаются неравновесные свойства сверхпроводников. Сообщалось как об индуцированном светом усилении сверхпроводимости [1–3], так и о наблюдении моды Хиггса [4–6]. В последнее время интерес вызывает и родственное семейство упорядоченных состояний – экситонные диэлектрики [7–12]. Среди теоретических работ в этом направлении нам бы хотелось выделить работу [13], в которой авторам удалось продемонстрировать новый механизм фотоусиления экситонного порядка в рамках двухзонной модели бесспиновых фермионов, связанных с фононами. По мнению авторов [13], сочетание фотовозбуждения и понижения симметрии гамильтониана может предоставить новую стратегию для увеличения сверхпроводящего параметра порядка в сверхпроводниках. Некоторая схожесть состояния экситонного конденсата со сверхпроводящим делает интересным изучение неравновесных свойств таких систем.

Что касается сильно коррелированных систем со спиновым кроссовером, до сих пор теоретические и экспериментальные работы по экситонному упорядочению в них фокусировались на исследовании их равновесных свойств [14–24]. Изучение же неравновесных свойств только началось. В связи с развитием в последнее время спектроскопии

накачки-зондирования (pump-probe) с высоким временным разрешением интерес представляет возможность кроссовера под действием фемтосекундных лазерных импульсов [25, 26].

В противоположность традиционным экситонным диэлектрикам, где кулоновское взаимодействие ответственно за электрон-дырочное спаривание и формирование экситонов, в случае систем со спиновым кроссовером взаимодействие, приводящее к экситонному упорядочению, обусловлено межузельным электронным перескоком. Тем не менее, механизм фотоусиления, предложенный в [13], может быть реализован и в этом случае. Нам удалось продемонстрировать, что в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером возможно фотоусиление экситонного конденсата, не связанное с переходом в метастабильное или какое-либо возбужденное состояние. Научная новизна настоящей работы заключается в выявлении кооперативных эффектов, обусловленных межатомным экситонным и электрон-фононным взаимодействиями, в условиях неравновесности.

2. Эффективный гамильтониан. Минимальной моделью сильнокоррелированных систем со спиновым кроссовером является двухзонная модель Хаббарда–Канамори. Гамильтониан модели может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_\Delta + \hat{H}_t + \hat{H}_{\text{Coulomb}}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое

$$\hat{H}_\Delta = \varepsilon_1 \sum_{i,\gamma} c_{1i\gamma}^\dagger c_{1i\gamma} + \varepsilon_2 \sum_{i,\gamma} c_{2i\gamma}^\dagger c_{2i\gamma} \quad (2)$$

¹⁾ e-mail: jso.krasn@mail.ru

содержит одноионную энергию электронов в одночастичных состояниях с уровнями энергии ε_1 и $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \Delta$, где Δ – энергия электронов в кристаллическом поле (из соображений удобства можно положить $\varepsilon_1 = 0$), i – номер узла решетки, $\gamma = \pm 1/2$ – проекция спина электрона. Второе слагаемое

$$\begin{aligned} \hat{H}_t = & t_{11} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} c_{1i\gamma}^\dagger c_{1j\gamma} + t_{22} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} c_{2i\gamma}^\dagger c_{2j\gamma} + \\ & + t_{12} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} \left(c_{2i\gamma}^\dagger c_{1j\gamma} + c_{1i\gamma}^\dagger c_{2j\gamma} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где $t_{\lambda\lambda'}$ – параметры перескока ($\lambda, \lambda' = 1, 2$ – орбитальный индекс) описывают перескок электронов между ближайшими соседними узлами кристаллической решетки с уровнями энергии ε_1 и ε_2 . Третье слагаемое

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{Coulomb}} = & U \sum_{\lambda, i} c_{\lambda i\uparrow}^\dagger c_{\lambda i\downarrow}^\dagger c_{\lambda i\uparrow} c_{\lambda i\downarrow} + \\ & + V \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i\uparrow}^\dagger c_{\lambda' i\downarrow}^\dagger c_{\lambda i\uparrow} c_{\lambda' i\downarrow} + \\ & + V \sum_{\lambda > \lambda', i, \gamma} c_{\lambda i\gamma}^\dagger c_{\lambda' i\gamma}^\dagger c_{\lambda i\gamma} c_{\lambda' i\gamma} + \\ & + J_H \sum_{\lambda > \lambda', i, \gamma} c_{\lambda i\gamma}^\dagger c_{\lambda' i\gamma}^\dagger c_{\lambda' i\gamma} c_{\lambda i\gamma} + \\ & + J_H \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i\uparrow}^\dagger c_{\lambda' i\downarrow}^\dagger c_{\lambda' i\uparrow} c_{\lambda i\downarrow} + \\ & + J'_H \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i\uparrow}^\dagger c_{\lambda i\downarrow}^\dagger c_{\lambda' i\uparrow} c_{\lambda' i\downarrow} \end{aligned} \quad (4)$$

содержит одноузельную энергию кулоновского взаимодействия электронов (электрон-электронное взаимодействие рассматривается в приближении Канамори с диагональным по орбитальным индексам матричным элементом U и недиагональным V , а также хундовскими параметрами обменного взаимодействия J_H, J'_H [27]).

Важной особенностью такой двухорбитальной модели является возможность формирования в случае половинного заполнения ($N_e = 2$ – среднее число электронов на узел кристаллической решетки) и в нулевом приближении по межузельным перескокам $t_{\lambda\lambda'} = 0$ различных локализованных многоэлектронных (двухчастичных) состояний (термов), которые характеризуются значениями спина $S = 0, 1$ и кроссовера между ними с ростом Δ . В области $\Delta < \Delta_C = \sqrt{(U - V + J_H)^2 + J'_H{}^2}$ основным является триплетное ($S = 1$) HS-состояние $|\sigma\rangle$ с энергией E_{HS} , трехкратно вырожденное по проекции спина $\sigma = 0, \pm 1$:

$$|\sigma\rangle = \begin{cases} a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, \sigma = +1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle + a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle \right), \sigma = 0, \\ a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \sigma = -1 \end{cases}$$

а при $\Delta > \Delta_C$ основным является синглетное ($S = 0$) LS-состояние $|s\rangle = C_1(\Delta) a_{1\uparrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle - C_2(\Delta) a_{2\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$ с энергией E_{LS} , где $C_1(\Delta) = \sqrt{1 - C_2^2(\Delta)}$, $C_2(\Delta) = x/2(1 + x + \sqrt{1 + x})$ – нормировочные коэффициенты ($x = J'_H{}^2 / \Delta^2$).

Для вывода эффективного гамильтониана удобно использовать X -операторы Хаббарда $X^{p,q} = |p\rangle\langle q|$ [28], построенные на собственных состояниях гамильтониана $\hat{H}_\Delta + \hat{H}_{\text{Coulomb}}$

$$(\hat{H}_\Delta + \hat{H}_{\text{Coulomb}}) |p\rangle = E_p |p\rangle \quad (5)$$

с различным числом электронов $N_e = 0, 1, 2, 3, 4$. Поскольку операторы Хаббарда образуют линейно независимый базис, то любой локальный оператор может быть выражен через линейную комбинацию X -операторов, в том числе одноэлектронный оператор уничтожения (рождения):

$$c_{\lambda i\gamma} = \sum_{pq} |p\rangle\langle p| c_{\lambda i\gamma} |q\rangle\langle q| = \sum_{pq} \chi_{\lambda\gamma}(p, q) X_i^{p,q}. \quad (6)$$

Или, поскольку число различных пар состояний (p, q) , отличающихся на единицу числом электронов, конечно, можно их пронумеровать и каждой паре поставить в соответствие номер l [29], имеющий смысл зонного индекса локальных фермиевских квазичастиц. Тогда $c_{i\lambda\gamma} = \sum_l \chi_{\lambda\gamma}(l) X_i^l$, $c_{i\lambda\gamma}^\dagger = \sum_l \chi_{\lambda\gamma}^*(l) X_i^{l\dagger}$.

С помощью (6) аномальные средние $\langle a_{2f\gamma}^\dagger a_{1f\gamma} \rangle$ (без переворота спина) и $\langle a_{2f\bar{\gamma}}^\dagger a_{1f\gamma} \rangle$ (с переворотом спина, $\bar{\gamma} = -\gamma$) могут быть представлены в виде

$$\langle c_{2f\gamma}^\dagger c_{1f\gamma} \rangle \approx -\gamma\sqrt{2} \left(C_2 \langle X_f^{s,0} \rangle + C_1 \langle X_f^{0,s} \rangle \right), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle c_{2f\bar{\gamma}}^\dagger c_{1f\gamma} \rangle \approx & 2\gamma \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) \left(C_2 \langle X_f^{s,-1} \rangle + C_1 \langle X_f^{-1,s} \rangle \right) - \\ & - 2\gamma \left(\gamma + \frac{1}{2} \right) \left(C_2 \langle X_f^{s,+1} \rangle + C_1 \langle X_f^{+1,s} \rangle \right). \end{aligned} \quad (8)$$

В выражениях (7) и (8) отброшены средние от X -операторов, построенных на состояниях с числом электронов меньше или больше двух. Мы рассматриваем случай половинного заполнения (двухчастичные состояния) с фиксированным числом электронов на узел кристаллической решетки (гомополярная модель твердого тела), поэтому вклад таких средних пренебрежимо мал.

Как видно из формул (7) и (8), экситонное спаривание описывается ненулевыми средними синглет-триплетных возбуждений. Здесь и ниже угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают квантово-статистическое среднее. Отличие от нуля средних $\langle X_i^{\sigma,s} \rangle = \langle (X_i^{s,\sigma})^\dagger \rangle = \langle X_i^{s,\sigma} \rangle^*$ означает квантово-механическое смешивание LS- и HS-состояний, но в отсутствии спин-орбитального взаимодействия. В представлении X -операторов Хаббарда гамильтониан (1) имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{i,p} E_p X_i^{p,p} + \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{l,k} t^{lk} X_i^{l\dagger} X_j^k. \quad (9)$$

Здесь E_p – энергия многоэлектронных термов, $t^{lk} = \sum_{\lambda,\lambda',\gamma} t_{\lambda\lambda'} \chi_{\lambda\gamma}^*(l) \chi_{\lambda'\gamma}(k)$ – перенормированные параметры перескока.

Используя гамильтониан (9) как исходный, мы можем получить эффективный гамильтониан, исключив из него межзонные перескоки. Для этого используем метод проекционных операторов, развитый в работе [30] для модели Хаббарда и в [31] для p - d -модели (см. также [15, 14]). Эффективный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S + \hat{H}_{n_{LS}n_{LS}} + \hat{H}_{ex}. \quad (10)$$

Здесь первое слагаемое – гамильтониан гейзенберговского типа содержит межатомное обменное взаимодействие

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right), \quad (11)$$

где $\hat{\mathbf{S}}_i$ – оператор спина $S = 1$: $\hat{S}_i^+ = \sqrt{2} (X_i^{+1,0} + X_i^{0,-1})$, $\hat{S}_i^- = \sqrt{2} (X_i^{0,+1} + X_i^{-1,0})$ и $\hat{S}_i^z = X_i^{+1,+1} - X_i^{-1,-1}$ [32]; $J = (t_{11}^2 + 2t_{12}^2 + t_{22}^2)/\Omega_g$ – величина межатомного обменного взаимодействия, Ω_g – энергия переноса заряда между центрами верхних и нижних хаббардовских подзон [30, 31]; $\hat{n}_i = 2 \left(X_i^{s,s} + \sum_{\sigma} X_i^{s,\sigma} \right) = 2 (\hat{n}_i^{LS} + \hat{n}_i^{HS})$ – оператор числа частиц на узле i ($\hat{n}_i^{LS(HS)}$ – оператор числа заполнения LS(HS)-состояния). Используя условие полноты $X^{s,s} + \sum_{\sigma} X^{s,\sigma} = 1$, можно показать, что $\langle \hat{n}_i \rangle = 2 (\langle \hat{n}_i^{LS} \rangle + \langle \hat{n}_i^{HS} \rangle) = 2 (n_{LS} + n_{HS}) = 2$, где $n_{LS(HS)}$ – среднее число частиц в LS(HS)-состоянии ($n_{LS} + n_{HS} = 1$).

Второе слагаемое

$$\hat{H}_{n_{LS}n_{LS}} = \frac{1}{2} \tilde{J} \sum_{\langle i,j \rangle} X_i^{s,s} \cdot X_j^{s,s} \quad (12)$$

описывает взаимодействие типа плотность-плотность низкоспиновых состояний, $\tilde{J} = [1 - (2C_1C_2)^2] (t_{11}^2 - 2t_{12}^2 + t_{22}^2)/\Omega_g$.

Третий член в (10) содержит межатомный перескок экситонов с амплитудой J'_{ex} и рождение/уничтожение на соседних узлах биэкситонов с амплитудой J''_{ex} с учетом энергии электронных конфигураций LS- и HS-состояний

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} = & -\frac{\varepsilon_S}{2} \sum_i \left(X_i^{s,s} - \sum_{\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma} \right) + \\ & + \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{1}{2} J'_{ex} (X_i^{\sigma,s} X_j^{s,\sigma} + X_i^{s,\sigma} X_j^{\sigma,s}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} J''_{ex} (-1)^{|\sigma|} (X_i^{\sigma,s} X_j^{\bar{\sigma},s} + X_i^{s,\sigma} X_j^{s,\bar{\sigma}}) \right], \quad (13) \end{aligned}$$

где $\varepsilon_S = E_{HS} - E_{LS}$ – спиновая щель, в отсутствие всех кооперативных взаимодействий отрицательному значению спиновой щели соответствует основное HS-состояние, а в случае положительной спиновой щели в качестве основного состояния реализуется LS-состояние; $J'_{ex} = 2C_1C_2(t_{11}t_{22} - t_{12}^2)/\Omega_g$, $J''_{ex} = (t_{11}t_{22} - t_{12}^2)/\Omega_g$, $\bar{\sigma} = -\sigma$. В (13) операторы Хаббарда $X_i^{\sigma,s}$ и $X_i^{s,\sigma}$ описывают возбуждения бозе-типа (экситоны) на узле i из низкоспинового синглетного состояния $|s\rangle$ в высокоспиновое триплетное $|\sigma\rangle$ с проекцией спина $\sigma = 0, \pm 1$ и наоборот. Первое слагаемое в квадратных скобках (13) описывает дисперсию экситонов за счет межатомных перескоков, такая дисперсия была рассмотрена еще в работе Вонсовского и Свирского [33]. Второе слагаемое в (13) содержит рождение и уничтожение биэкситонов на соседних узлах решетки (i, j) , что сразу усложняет дисперсию экситонов по сравнению с обычной в методе сильной связи [33]. Вблизи спинового кроссовера $C_1 \approx 1$, $C_2 \approx 0$, поэтому $J'_{ex} \approx 0$. В этих условиях биэкситонные возбуждения играют главную роль в формировании дисперсии экситонов. Гамильтониан (13) описывает кинетическое экситон-экситонное взаимодействие [34] в представлении X -операторов Хаббарда.

Если ввести обозначения $\hat{d}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{d}_+ + \hat{d}_-)$, $\hat{d}_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} (\hat{d}_+ - \hat{d}_-)$, $\hat{d}_z = \hat{d}_0$ [20], где $\hat{d}_+ = X^{s,+}$, $\hat{d}_- = X^{s,-}$, $\hat{d}_0 = X^{s,0}$, то последнее слагаемое в (13) можно представить в виде

$$\frac{J'_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\mathbf{d}}_i^\dagger \cdot \hat{\mathbf{d}}_j + \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j^\dagger) - \frac{J''_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\mathbf{d}}_i^\dagger \cdot \hat{\mathbf{d}}_j^\dagger + \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j). \quad (14)$$

Вектор $\hat{\mathbf{d}} = (\hat{d}_x, \hat{d}_y, \hat{d}_z)$ соответствует так называемому

тому **d**-вектору в теории триплетной сверхпроводимости.

В работе [35] нами рассмотрены особенности формирования экситонного бозе-конденсата, представляющего собой конденсацию локальных (на узле кристаллической решетки) магнитных экситонов (экситонов малого радиуса), в сильно коррелированных системах вблизи спинового кроссовера, описывающегося гамильтонианом (13) и экситонным параметром порядка $\Delta_{ex}^\sigma = \langle X_i^{s,\sigma} \rangle$. В [35] показано сосуществование антиферромагнетизма и экситонного конденсата и возникновение дальнего антиферромагнитного порядка вследствие экситонного упорядочения даже в отсутствие межатомного обменного взаимодействия (11).

В дальнейшем для удобства все величины мы будем указывать в единицах обменного взаимодействия $J = 28$ К [36] даже тогда, когда это взаимодействие не учитывается.

С учетом электрон-фононного взаимодействия будем иметь

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{eff}} + \hat{H}_{1ph} + \hat{H}_{2ph}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1ph} = & \omega_{0(1)} \sum_i \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_1 \sum_i \left(a_i + a_i^\dagger \right) \left(X_i^{s,s} - \sum_{\sigma=-1}^{+1} X_i^{\sigma,\sigma} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

содержит диагональное электрон-фононное взаимодействие и описывает изотропное сжатие/расширение катион-анионного октаэдра (“a” типа) фононная мода соответствует дыхательной моде октаэдра металл-лиганд).

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2ph} = & \omega_{0(2)} \sum_i \sum_{\sigma=-1}^{+1} \left(b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_2 \sum_i \sum_{\sigma=-1}^{+1} \left(b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger \right) (X_i^{s,\sigma} + X_i^{\sigma,s}) \end{aligned} \quad (17)$$

описывает недиагональные электрон-фононные процессы перехода из синглета $|s\rangle$ в триплет $|\sigma\rangle$ и обратно. Здесь $g_{1(2)}$ – константы электрон-фононного взаимодействия, $\omega_{0(1,2)}$ – частоты фононов “a” и “b” типа.

3. Игрушечная модель. Фотоусиление экситонного конденсата в одномерной двухзонной модели безспиновых фермионов, взаимодействующих с фононами “a” и “b” типа, обсуждалось в работе [13]. Решая систему уравнений движения для операторов

электронной и фононной подсистем и их средних в приближении зависящего от времени среднего поля с учетом внешней накачки, авторам [13] удалось продемонстрировать новый механизм фотоусиления экситонного упорядочения, обусловленный возникновением массивной моды (открытием щели) в спектре коллективных возбуждений и изменением основного состояния под действием внешнего излучения и не связанный с возбуждением метастабильных или каких-либо других лежащих выше по энергии состояний системы. В отличие от [13], где кулоновское взаимодействие ответственно за электрон-дырочное спаривание и формирование экситонов, в нашем случае взаимодействия J'_{ex} и J''_{ex} в гамильтониане (13) имеют кинематическую природу и обусловлены перескоком электронов между узлами кристаллической решетки, но механизм фотоусиления [13] может быть реализован и в этом случае. Однако решение системы уравнений движения для X -операторов Хаббарда с гамильтонианом (15) является довольно громоздкой задачей. Попробуем максимально упростить рассмотренный выше случай и проанализировать механизм фотоусиления на примере искусственно упрощенного гамильтониана двухуровневой системы локальных одноэлектронных состояний “0” и “1” с энергией ε_0 и ε_1 . Для этого вместо (13) запишем, аналогичное по своему содержанию, выражение (18), но в представлении одночастичных фермиевских безспиновых операторов $c_{\lambda i}$ ($c_{\lambda i}^\dagger$) уничтожения (рождения) электронов на узле i в состоянии $\lambda = 0, 1$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} = & \varepsilon_0 \sum_i c_{0i}^\dagger c_{0i} + \varepsilon_1 \sum_i c_{1i}^\dagger c_{1i} + \\ & + \frac{J'_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c_{0i}^\dagger c_{1i} c_{1j}^\dagger c_{0j} + c_{1i}^\dagger c_{0i} c_{0j}^\dagger c_{1j} \right) + \\ & + \frac{J''_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c_{1i}^\dagger c_{0i} c_{1j}^\dagger c_{0j} + c_{0i}^\dagger c_{1i} c_{0j}^\dagger c_{1j} \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Если в (13), к примеру, оператор $X_i^{\sigma,s}$ описывал переход из двухчастичного синглетного $|s\rangle$ состояния в состояние триплета $|\sigma\rangle$, то аналогичную роль в (18) играет операторная конструкция $c_{1i}^\dagger c_{0i}$.

С учетом электрон-фононного взаимодействия будем иметь

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{1ph} + \hat{H}_{2ph}, \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1ph} = & \hbar\omega_{0(1)} \sum_i \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_1 \sum_i \left(a_i + a_i^\dagger \right) \left(c_{0i}^\dagger c_{0i} - c_{1i}^\dagger c_{1i} \right) \end{aligned} \quad (20)$$

аналогично (16) содержит диагональное электрон-фоонное взаимодействие, а

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2ph} = & \hbar\omega_{(2)} \sum_i \left(b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_2 \sum_i \left(b_i + b_i^\dagger \right) \left(c_{1i}^\dagger c_{0i} + c_{0i}^\dagger c_{1i} \right) \end{aligned} \quad (21)$$

аналогично (17) описывает недиагональные электрон-фоонные процессы перехода из состояния “0” в “1” и обратно.

В приближении среднего поля (MF) гамильтониан (18) имеет вид (22)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex}^{MF} = & \varepsilon_0 \sum_i c_{0i}^\dagger c_{0i} + \varepsilon_1 \sum_i c_{1i}^\dagger c_{1i} + \\ & + \sum_i \left[(zJ'_{ex}\phi + zJ''_{ex}\phi^*) c_{1i}^\dagger c_{0i} + \right. \\ & \left. + (zJ'_{ex}\phi^* + zJ''_{ex}\phi) c_{0i}^\dagger c_{1i} \right] - \\ & - zJ'_{ex} N \phi \phi^* - z \frac{J''_{ex}}{2} N (\phi \phi + \phi^* \phi^*), \end{aligned} \quad (22)$$

где $\phi = \langle \hat{\phi}_i \rangle \equiv \langle c_{0i}^\dagger c_{1i} \rangle$ – экситонный параметр порядка, аналогичный $\Delta_{ex}^{\sigma} = \langle X_i^{s,\sigma} \rangle$ в случае (13); N – число узлов кристаллической решетки.

Решая самосогласованно задачу на собственные значения

$$\hat{H}_{MF} |i, m\rangle = E_m |i, m\rangle, \quad (23)$$

где $|i, m\rangle$ ($m = 0, 1, \dots, \mathcal{N}$) – собственные состояния гамильтониана $\hat{H}_{MF} = \hat{H}_{ex}^{MF} + \hat{H}_{1ph} + \hat{H}_{2ph}$, можно найти интересные средние

$$\phi = \frac{1}{Z} \sum_m \langle i, m | \hat{\phi}_i | i, m \rangle e^{-E_m/k_B T}, \quad (24)$$

отвечающие глобальному минимуму свободной энергии $F = -k_B T \ln Z$, где $Z = \sum_m e^{-E_m/k_B T}$ – статистическая сумма системы, для различных значений щели $\varepsilon_S = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$ (или внешнего приложенного давления P) и температуры T . Решения (23) и (24), отвечающие локальным минимумам свободной энергии F , являются метастабильными.

На рисунке 1 представлена зависимость ϕ от величины расщепления ε_S , полученная в приближении среднего поля при $T = 0$. Красной штриховой линией показан результат расчета без электрон-фоонного взаимодействия, а синей сплошной линией при $g_2 = 1.25J$ и $g_1 = 0$. Видно, что недиагональное электрон-фоонное взаимодействие приводит к увеличению экситонной области. Наоборот, при $g_2 = 0$ и $g_1 = 1.25J$ (зеленая сплошная линия на рис. 1) область экситонного упорядочения уменьшается.

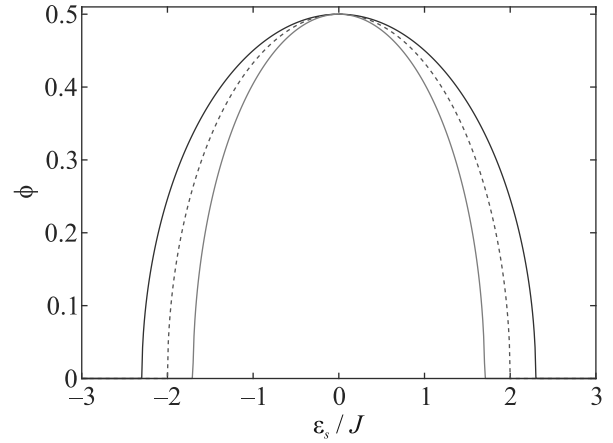


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость экситонного параметра порядка ϕ от величины расщепления ε_S , полученная в приближении среднего поля при $T = 0$ без учета (красная штриховая линия, $g_1 = 0, g_2 = 0$), с учетом недиагонального (синяя сплошная линия, $g_1 = 0, g_2 = 1.25J$) и диагонального (зеленая сплошная линия, $g_1 = 1.25J, g_2 = 0$) электрон-фоонного взаимодействия. Расчеты выполнены для следующего набора параметров: $z = 4, J = 28$ К, $J''_{ex} = -0.5J$

4. Спектр возбуждений. Для нахождения спектра экситонных возбуждений: коллективных – в фазе экситонного конденсата ($\phi \neq 0$ на рис. 1) и квазичастичных (одночастичных) – вне области экситонного упорядочения ($\phi = 0$ на рис. 1), используем обобщенный метод спиновых волн. Ниже мы вкратце изложим содержание метода. Для более детального ознакомления можно обратиться к работам [37, 38, 14].

С учетом определения оператора $\hat{\phi}_i \equiv c_{0i}^\dagger c_{1i}$, последние два слагаемых в (18) могут быть представлены в виде, аналогичном (14):

$$\begin{aligned} & \frac{J'_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\phi}_i^\dagger \cdot \hat{\phi}_j + \hat{\phi}_i \cdot \hat{\phi}_j^\dagger \right) + \\ & + \frac{J''_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\phi}_i \cdot \hat{\phi}_j + \hat{\phi}_i^\dagger \cdot \hat{\phi}_j^\dagger \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Гамильтониан (19) может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_{MF} + \delta \hat{H}_{ex}, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} \delta \hat{H}_{ex} = & \frac{1}{2} J'_{ex} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\delta \hat{\phi}_i \cdot \delta \hat{\phi}_j^\dagger + \delta \hat{\phi}_i^\dagger \cdot \delta \hat{\phi}_j \right) + \\ & + \frac{1}{2} J''_{ex} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\delta \hat{\phi}_i \cdot \delta \hat{\phi}_j + \delta \hat{\phi}_i^\dagger \cdot \delta \hat{\phi}_j^\dagger \right) \end{aligned} \quad (27)$$

описывает взаимодействия за средним полем, $\delta \hat{\phi}_i = \hat{\phi}_i - \langle \hat{\phi} \rangle_{MF}$.

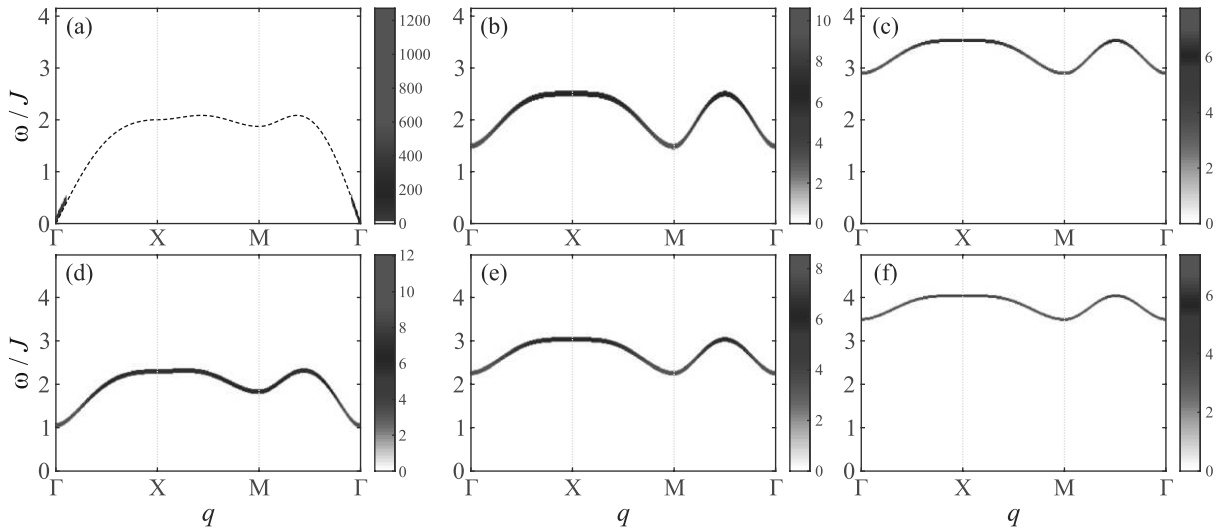


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр возбуждений. В верхнем ряду приведены результаты расчета в отсутствие электрон-фононного взаимодействия при $\varepsilon_S/J = 1.5$ (a) – в фазе экситонного конденсата и при $\varepsilon_S/J = 2.5$ (b), 3.5 (c) – вне фазы экситонного конденсата. В нижнем ряду приведены результаты расчета при наличии недиагонального электрон-фононного взаимодействия ($g_1 = 0$, $g_2 = 1.25J$) для $\varepsilon_S/J = 2$ (d) – в области экситонного упорядочения и для $\varepsilon_S/J = 3$ (e), 4 (f) – вне области экситонного упорядочения. Цветом показано распределение спектрального веса. Расчеты выполнены для следующего набора параметров: $z = 4$, $J = 28$ К, $J''_{ex} = -0.5J$

Локальную флуктуацию $\delta\hat{\phi}_i$ можно разложить по X -операторам Хаббарда, построенным на собственных состояниях гамильтониана $\hat{H}_{MF}$, которые определяются из решения самосогласованной задачи на собственные значения (23)–(24). Таким образом, получаем

$$\delta\hat{\phi}_i = \sum_{m,n} \langle i, m | \delta\hat{\phi}_i | i, n \rangle X_i^{m,n} = \sum_{m,n} \gamma(m, n) X_i^{m,n}, \quad (28)$$

где $X_i^{m,n} = |i, m\rangle \langle n, i|$.

В обобщенном представлении Гольдштейна–Примакова

$$X_i^{m,0} = h_{im}^\dagger \left(1 - \sum_{n=1}^N h_{in}^\dagger h_{in} \right)^{1/2} \quad (29)$$

и $X_i^{0,m} = (X_i^{m,0})^\dagger$ для $m \geq 1$,

$$X_i^{m,n} = h_{im}^\dagger h_{in} \quad (30)$$

для $m, n \geq 1$ и

$$X_i^{0,0} = 1 - \sum_{n=1}^N h_{in}^\dagger h_{in}, \quad (31)$$

где $h_{in}^\dagger$ (h_{in}) – бозе-операторы рождения (уничтожения) Гольдштейна–Примакова. Выражение (31) есть следствие условия: $1 \equiv X_i^{0,0} + \sum_{n=1}^N h_{in}^\dagger h_{in}$. Разлагая

(29) в ряд и используя, что при низких температурах $\langle i, 0 | \delta\hat{\phi}_i | i, 0 \rangle = \langle i, 0 | \hat{\phi}_i | i, 0 \rangle - \langle \hat{\phi} \rangle_{MF} \approx 0$ или $\gamma(0, 0) \approx 0$, гамильтониан (26) можно представить в виде квадратичной формы, отбросив слагаемые более высокого порядка:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SW} = & \sum_{\mathbf{q}, m \geq 1} \Delta E_m h_{\mathbf{q}m}^\dagger h_{\mathbf{q}m} + \\ & + \sum_{\mathbf{q}, m \geq n \geq 1} \gamma_{\mathbf{q}} \left\{ J_{mn} h_{\mathbf{q}m}^\dagger h_{-\mathbf{q}n}^\dagger + \tilde{J}_{mn} h_{\mathbf{q}m}^\dagger h_{\mathbf{q}n} + \text{h.c.} \right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

где $\Delta E_m = E_m - E_0$, $\gamma_{\mathbf{q}} = \sum_{\boldsymbol{\rho}} e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}$ (вектор $\boldsymbol{\rho}$ пробегает по всем ближайшим соседям), $h_{\mathbf{q}m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} h_{im}$,

$$\begin{aligned} J_{mn} = & \frac{J'_{ex}}{2} \{ \gamma^*(0, m) \gamma(n, 0) + \gamma(m, 0) \gamma^*(0, n) \} + \\ & + \frac{J''_{ex}}{2} \{ \gamma(m, 0) \gamma(n, 0) + \gamma^*(0, m) \gamma^*(0, n) \}, \\ \tilde{J}_{mn} = & \frac{J'_{ex}}{2} \{ \gamma^*(0, m) \gamma(0, n) + \gamma(m, 0) \gamma^*(n, 0) \} + \\ & + \frac{J''_{ex}}{2} \{ \gamma(m, 0) \gamma(0, n) + \gamma^*(0, m) \gamma^*(n, 0) \}. \end{aligned} \quad (33)$$

С помощью параунитарного преобразования [39] гамильтониан (32) может быть приведен к диагональному виду

$$\hat{H}_{SW} = \sum_{\mathbf{q}, \mu} \omega_{\mathbf{q}\mu} \alpha_{\mathbf{q}\mu}^\dagger \alpha_{\mathbf{q}\mu} + \text{const.} \quad (34)$$

Обобщенный метод спиновых волн позволяет определять динамическую восприимчивость. В нашем случае для гамильтониана (19) удобно ввести псевдоспин $\hat{\mathbf{P}}$ с компонентами $\hat{P}_x = \hat{\phi} + \hat{\phi}^\dagger$ и $\hat{P}_y = i(\hat{\phi} - \hat{\phi}^\dagger)$ и определить соответствующую псевдоспиновую восприимчивость. При $T = 0$ динамическая псевдоспиновая восприимчивость имеет вид:

$$\begin{aligned} \chi_{\xi\xi'}(\mathbf{q}, \omega) &= i \int_0^\infty dt \langle 0 | [\delta \hat{P}_{\mathbf{q}\xi}(t), \delta \hat{P}_{-\mathbf{q}\xi'}] | 0 \rangle e^{i\omega t - \delta t} = \\ &= - \int_{-\infty}^\infty dE \frac{A_{\xi\xi'}(\mathbf{q}, E)}{\omega - E + i\delta}, \end{aligned} \quad (35)$$

где $|0\rangle$ – вакуумное состояние для операторов $\alpha_{\mathbf{q}\mu}$, $A_{\xi\xi'}(\mathbf{q}, E)$ – спектральная функция, описывающая распределение спектрального веса коллективных возбуждений в зоне Бриллюэна.

$$A_{\xi\xi'}(\mathbf{q}, E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu} W_{\mathbf{q}\xi\mu} W_{\mathbf{q}\xi'\mu}^* \text{Im} \left(\frac{1}{E - \omega_{\mathbf{q}\mu} + i\delta} \right), \quad (36)$$

где $W_{\mathbf{q}\xi\mu} = \sum_{\mathbf{q}'} \langle 0 | \delta \hat{P}_{\mathbf{q}\xi} | \mu, \mathbf{q}' \rangle \langle \mu, \mathbf{q}' | \delta \hat{P}_{-\mathbf{q}\xi'} | 0 \rangle$, $|\mu, \mathbf{q}\rangle = \alpha_{\mathbf{q}\mu}^\dagger |0\rangle$.

На рисунке 2 штриховой линией показан закон дисперсии $\omega_{\mathbf{q}\mu}$, а цветом – распределение полного спектрального веса $A(\mathbf{q}, E) = A_{xx}(\mathbf{q}, E) + A_{yy}(\mathbf{q}, E)$. В верхнем ряду приведены результаты расчета в отсутствие электрон-фононного взаимодействия, в фазе (а) и вне фазы (б), (с) экситонного конденсата. Везде вне фазы экситонного конденсата спектр имеет щель (рис. 2б, с), которая обращается в нуль на границе фазового перехода второго рода, что согласуется с общими представлениями о том, что ниже точки фазового перехода должна возникнуть бесщелевая голдстоуновская мода (рис. 2а), описывающая коллективные возбуждения в фазе экситонного конденсата. Спектр на рис. 2б, с описывает коллективные с точки зрения электронной (фермиевской) системы возбуждения, но к нему можно относиться как к спектру квазичастичных (одночастичных) возбуждений системы бозе-частиц, описываемых эффективным гамильтонианом (18). Появлению бесщелевой голдстоуновской моды (рис. 2а) предшествует закрытие щели в спектре квазичастичных экситонных возбуждений (рис. 2б, с).

Диагональное электрон-фононное взаимодействие g_1 не приводит к качественным изменениям

в спектре. Напротив, недиагональное электрон-фононное взаимодействие g_2 (в нижнем ряду на рис. 2 приведены результаты расчета при наличии только недиагонального электрон-фононного взаимодействия ($g_2 = 1.25J$) в области (д) и вне области (е), (ф) экситонного упорядочения) приводит к открытию щели в спектре коллективных возбуждений (рис. 2д). В этом случае бозевский спектр возбуждений – одночастичных экситонных (рис. 2е, ф) и коллективных в экситонной фазе (рис. 2д) – по обе стороны точки фазового перехода имеет щель. Спектр одиночных (одночастичных) возбуждений был рассчитан нами в работе [40] методом двухвременных температурных функций Грина и полностью согласуется со спектром, полученным обобщенным методом спиновых волн в настоящей работе.

Наличие щели в спектре коллективных и одночастичных возбуждений, как мы увидим ниже, играет ключевую роль в фотоусилении и фотоиндуцировании экситонного упорядочения.

5. Фотоусиление. Добавим к (19) слагаемое, описывающее взаимодействие с внешним излучением:

$$\hat{H}(t) = \hat{H} + \hat{V}(t), \quad (37)$$

где

$$\hat{V}(t) = E(t) \sum_i \left(c_{1i\gamma}^\dagger c_{0i\gamma} + c_{0i\gamma}^\dagger c_{1i\gamma} \right). \quad (38)$$

Внешнее поле $E(t)$ в (38) зададим в виде цуга $E(t) = E_0 \sin(\Omega t) \exp \left[-(t - t_p)^2 / (2\sigma_p^2) \right]$ с $\Omega = 6\tau_0^{-1}$, $\sigma_p = 3\tau_0$, $t_p = 25\tau_0$ и $E_0 = 0.15J$, где $\tau_0 = 10^{-12}$ с.

Для получения замкнутой системы уравнений движения для экситонного параметра порядка в уравнении $\dot{\phi}_i = -i \langle [\hat{\phi}_i, \hat{H}(t)] \rangle$ используем расщепление, соответствующее приближению среднего поля. Другими словами, вместо (18) в (37) будем использовать (22), с зависящим от времени экситонным параметром порядка $\phi(t)$ (зависящее от времени приближение среднего поля). Кроме того, используем приближение $(b_i^\dagger + b_i) (c_{i,1}^\dagger c_{i,0} + c_{i,0}^\dagger c_{i,1}) \rightarrow X(t) (c_{i,1}^\dagger c_{i,0} + c_{i,0}^\dagger c_{i,1}) + 2\text{Re}\phi(t) (b_i^\dagger + b_i)$ [13], где $X(t) = \langle b_i^\dagger + b_i \rangle$. При таком расщеплении уравнений движения теряется информация о спектре коллективных возбуждений (рис. 2). Чтобы сохранить кооперативность и учесть наличие коллективных возбуждений, добавим к гамильтониану (22) малый межузельный перескок $\sum_{\langle i,j \rangle, \lambda=0,1} t_\lambda c_{\lambda i}^\dagger c_{\lambda j}$

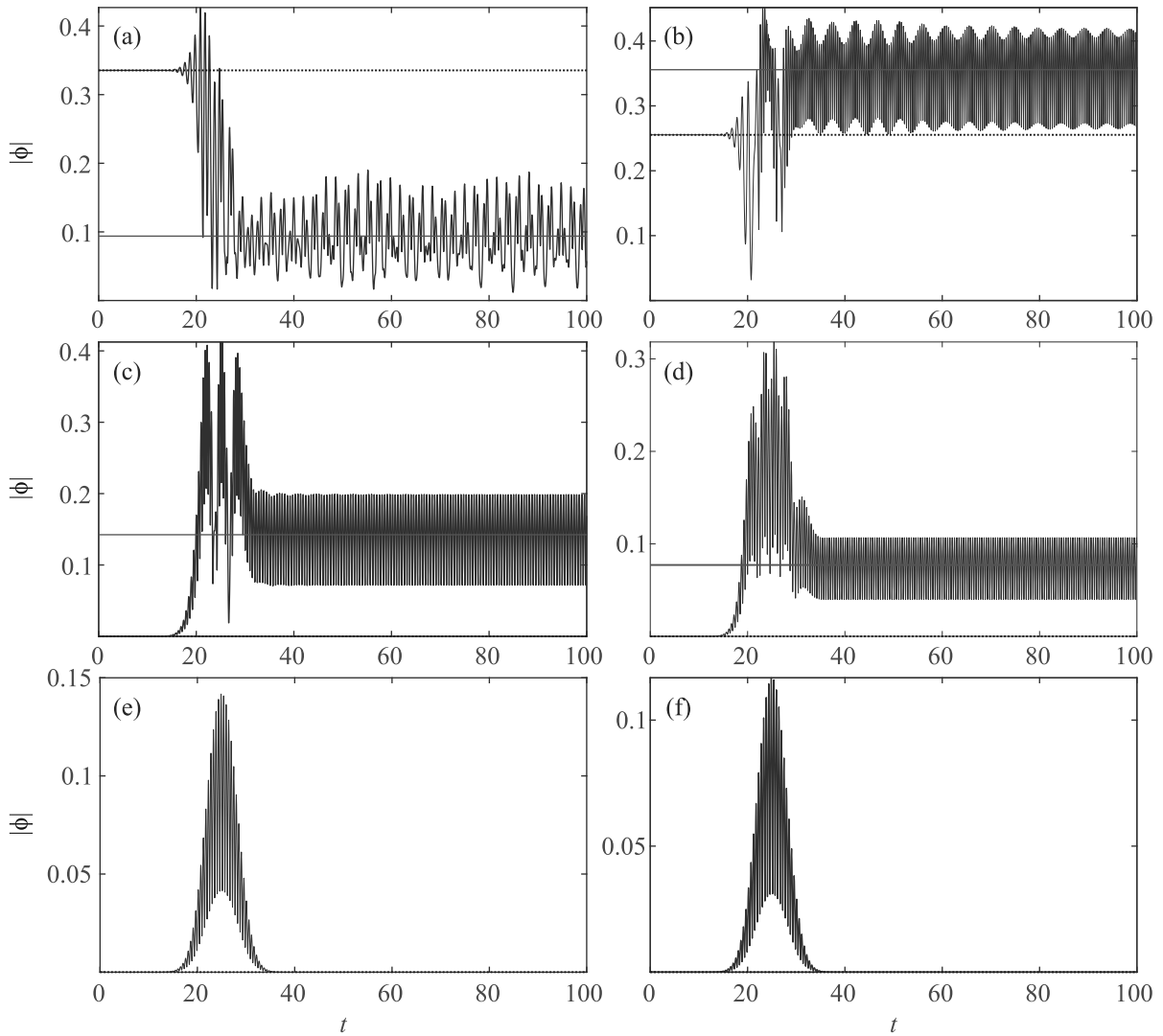


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость экситонного параметра порядка $|\phi|$ от времени после воздействия внешнего импульса излучения. Слева приведены результаты расчета в отсутствие электрон-фононного взаимодействия при $\varepsilon_S/J = 1.5$ (a), 2.5 (c) и 3.5 (e). Справа приведены результаты расчета при наличии недиагонального электрон-фононного взаимодействия ($g_2 = 1.25J$) для $\varepsilon_S/J = 2$ (b), 3 (d) и 4 (f). Начальное термодинамически равновесное состояние отмечено штриховой линией. Красной сплошной линией показано среднее значение, около которого осциллирует параметр порядка после выключения внешнего излучения. Время t указано в единицах $\tau_0 = 10^{-12}$ с. Расчеты выполнены для следующего набора параметров: $z = 4$, $J = 28$ К, $J''_{ex} = -0.5J$

($t_\lambda = (-1)^{\lambda+1}0.07J$), тогда в представлении волнового вектора будем иметь:

$$\dot{\phi}_{\mathbf{q}}(t) = -i\varepsilon_S(\mathbf{q})\phi_{\mathbf{q}}(t) - i\{zJ'_{ex}\phi(t) + zJ''_{ex}\phi^*(t) + g_2X(t) + E(t)\}\Delta n_{\mathbf{q}}(t); \quad (39)$$

$$\Delta \dot{n}_{\mathbf{q}}(t) = 4zJ'_{ex}[\text{Re}\phi(t)\text{Im}\phi_{\mathbf{q}}(t) - \text{Re}\phi_{\mathbf{q}}(t)\text{Im}\phi(t)] + 4zJ''_{ex}[\text{Re}\phi(t)\text{Im}\phi_{\mathbf{q}}(t) + \text{Re}\phi_{\mathbf{q}}(t)\text{Im}\phi(t)] + 4[g_2X(t) + E(t)]\text{Im}\phi_{\mathbf{q}}; \quad (40)$$

$$\ddot{X}(t) = -\omega_{0(2)}^2 X(t) - 2g_2\omega_{0(2)}[\phi(t) + \phi^*(t)], \quad (41)$$

где $\Delta n_{\mathbf{q}}(t) \equiv \langle c_{0\mathbf{q}}^\dagger c_{0\mathbf{q}} \rangle - \langle c_{1\mathbf{q}}^\dagger c_{1\mathbf{q}} \rangle$, $\phi_{\mathbf{q}}(t) \equiv \langle c_{0\mathbf{q}}^\dagger c_{1\mathbf{q}} \rangle$, $\phi(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}}(t)$ и $\varepsilon_S(\mathbf{q}) \equiv (t_{1\mathbf{q}} - t_{0\mathbf{q}}) + \varepsilon_S$.

На рисунке 3 приведены результаты решения системы уравнений (39)–(41) при $g_2 = 0$ (слева) и при $g_2 = 1.25J$ (справа). Далеко вне экситонной области (рис. 3е, ф) в обоих случаях система после выключения внешнего излучения возвращается в исходное термодинамически равновесное состояние, отмеченное штриховой линией на всех рисунках. Вблизи экситонной области (рис. 3с, d) после выключе-

ния внешнего воздействия параметр порядка испытывает временные осцилляции около среднего значения, отмеченного красной сплошной линией на всех рисунках, отличного и больше равновесного (фотоиндуцирование экситонного упорядочения). Наконец в экситонной области (рис. 3а, б) мы наблюдаем два противоположных результата: в отсутствии электрон-фононного взаимодействия (рис. 3а) происходит уменьшение параметра порядка, а при $g_2 = 1.25J$ (рис. 3б) имеет место фотоусиление экситонного конденсата. Наблюдаемое поведение можно понять, используя представление о спектре коллективных возбуждений (рис. 2). При $g_2 = 0$ в экситонной фазе (рис. 3а) наличие безмассовых голдстоуновских мод ведет к бесцелевому энергетическому спектру системы (рис. 2а), поэтому любое малое внешнее воздействие приводит к возбуждению коллективных мод и уменьшению параметра порядка (рис. 3а). В отсутствии релаксационных и диссипативных процессов в уравнениях движения (39)–(41), система остается в возбужденном состоянии после выключения накачки. При $g_2 = 1.25J$ в экситонной фазе (рис. 3б) в спектре возбуждений открывается щель (рис. 2д) и возбуждение коллективных мод в этом случае становится затруднительным. Внешнее излучение приводит к изменению основного состояния – его временной зависимости и большему смешиванию состояний “0” и “1”. Вне экситонной области в обоих случаях (рис. 3с, д) в спектре уже одиночных экситонных возбуждений также имеется щель (рис. 2б, е), поэтому мы наблюдаем фотоиндуцирование экситонного конденсата (рис. 3с, д). Далеко вне экситонной фазы (при больших ε_S/J , рис. 3е, ф) энергетический интервал между состояниями “0” и “1” становится непреодолимо большим и фотоиндуцирование экситонного конденсата становится невозможным.

Как уже отмечалось выше, существует довольно сильная взаимосвязь между экситонным и магнитным упорядочением [35], поэтому изменение экситонного конденсата неизбежно приведет к отклику магнитной подсистемы.

Мы надеемся, что наша работа послужит стимулом для дальнейших экспериментальных исследований сильно коррелированных систем со спиновым кроссовером с применением современных методов спектроскопии накачки-зондирования с высоким временным разрешением.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда # 22-22-20007, Красноярского краевого фонда науки.

1. D. Fausti, R. I. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. C. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, and A. Cavalleri, *Science* **331**(6014), 189 (2011).
2. S. Kaiser, C. R. Hunt, D. Nicoletti, W. Hu, I. Gierz, H. Y. Liu, M. Le Tacon, T. Loew, D. Haug, B. Keimer, and A. Cavalleri, *Phys. Rev. B* **89**, 184516 (2014).
3. M. Mitrano, A. Cantaluppi, D. Nicoletti, S. Kaiser, A. Perucchi, S. Lupi, P. Di Pietro, D. Pontiroli, M. Ricco, S. Clark, D. Jaksch, and A. Cavalleri, *Nature* **530**, 461 (2016).
4. R. Matsunaga, Y. I. Hamada, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, and R. Shimano, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057002 (2013).
5. R. Matsunaga, N. Tsuji, H. Fujita, A. Sugioka, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, H. Aoki, and R. Shimano, *Science* **345**(6201), 1145 (2014).
6. R. Matsunaga, N. Tsuji, K. Makise, H. Terai, H. Aoki, and R. Shimano, *Phys. Rev. B* **96**, 020505 (2017).
7. T. Rohwer, S. Hellmann, M. Wiesenmayer, C. Sohrt, A. Stange, B. Slomski, A. Carr, Y. Liu, L. M. Avila, M. Kallane, S. Mathias, L. Kipp, K. Rossnagel, and M. Bauer, *Nature* **471**, 490 (2011).
8. S. Hellmann, T. Rohwer, M. Kallane, K. Hanff, C. Sohrt, A. Stange, A. Carr, M. Murnane, H. Kapteyn, L. Kipp, M. Bauer, and K. Rossnagel, *Nat. Commun* **3**, 1069 (2012).
9. M. Porer, U. Leierseder, J.-M. Menard, H. Dachraoui, L. Mouchliadis, I. E. Perakis, U. Heinzmann, J. Demsar, K. Rossnagel, and R. Huber, *Nature Mater* **13**, 857 (2014).
10. D. Golež, P. Werner, and M. Eckstein, *Phys. Rev. B* **94**, 035121 (2016).
11. S. Mor, M. Herzog, D. Golež, P. Werner, M. Eckstein, N. Katayama, M. Nohara, H. Takagi, T. Mizokawa, C. Monney, and J. Stähler, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 086401 (2017).
12. D. Werdehausen, T. Takayama, M. Hoppner, G. Albrecht, A. W. Rost, Y. Lu, D. Manske, H. Takagi, and S. Kaiser, *Sci. Adv.* **4**, eaap8652 (2018).
13. Y. Murakami, D. Golež, M. Eckstein, and P. Werner, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 247601 (2017).
14. J. Nasu, T. Watanabe, M. Naka, and S. Ishihara, *Phys. Rev. B* **93**, 205136 (2016).
15. J. Kuneš, *J. Phys. Condens. Matter* **27**, 333201 (2015).
16. P. Werner and A. J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 126405 (2007).
17. R. Suzuki, T. Watanabe, and S. Ishihara, *Phys. Rev. B* **80**, 054410 (2009).
18. L. Balents, *Phys. Rev. B* **62**, 2346 (2000).
19. T. Kaneko and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **90**, 245144 (2014).
20. J. Kuneš and P. Augustinský, *Phys. Rev. B* **89**, 115134 (2014).
21. A. Sotnikov and J. Kuneš, *Sci. Rep.* **6**, 30510 (2016).

22. T. Tatsuno, E. Mizoguchi, J. Nasu, M. Naka, and S. Ishihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**(8), 083706 (2016).
23. G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 197201 (2013).
24. A. Ikeda, Y. H. Matsuda, K. Sato, Y. Ishii, H. Sawabe, D. Nakamura, S. Takeyama, and J. Nasu, *Nat. Commun.* **14**, 1744 (2023).
25. S. Londo, S. Biswas, I. V. Pinchuk, A. Boyadzhiev, R. K. Kawakami, and L. R. Baker, *J. Phys. Chem. C* **126**, 2669 (2022).
26. T. K. Ekanayaka, K. P. Maity, B. Doudin, and P. A. Dowben, *Nanomaterials* **12**(10), 1742 (2022).
27. J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.* **30**(3), 275 (1963).
28. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. A* **277**(1369), 237 (1964).
29. R. O. Zaitsev, *Sov. Phys. JETP* **43**, 574 (1976).
30. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, *J. Phys. C* **10**(10), L271 (1977).
31. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **95**, 144424 (2017).
32. V. V. Val'kov and S. G. Theor. Math. Phys. **50**(3), 466 (1982).
33. S. V. Vonsovskii and M. S. Svirskii, *Sov. Phys. JETP* **20**(4), 914 (1965).
34. V. M. Agranovich and B. S. Toshich, *JETP* **26**, 104 (1968).
35. Y. S. Orlov, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 704 (2023).
36. M. J. R. Hoch, S. Nellutla, J. van Tol, E. S. Choi, J. Lu, H. Zheng, and J. F. Mitchell, *Phys. Rev. B* **79**, 214421 (2009).
37. F. P. Onufrieva, *Sov. Phys. JETP* **62**, 1311 (1985).
38. J. Nasu and S. Ishihara, *Phys. Rev. B* **88**, 205110 (2013).
39. J. Colpa, *Physica A* **93**, 327 (1978).
40. Y. S. Orlov, S. V. Nikolaev, V. I. Kuz'min, A. E. Zarubin, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **106**, 235120 (2022).

Зависимость скорости релаксации когерентных состояний от числа коррелированных спинов и порядка когерентности

В. Е. Зобов⁺, А. А. Лундин^{*1)}

⁺ Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН –
обособленное подразделение Федерального исследовательского центра “Красноярский научный центр
Сибирского отделения РАН”, 660036 Красноярск, Россия

^{*} Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, 117977 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 марта 2023 г.

После переработки 17 мая 2023 г.

Принята к публикации 18 мая 2023 г.

Рассматривается релаксация компонент многоквантового спектра ЯМР твердого тела под влиянием диполь-дипольных взаимодействий на периоде эволюции. Учтено, что на подготовительном периоде образуются кластеры динамически коррелированных спинов разных размеров, деградация которых зависит от их размера и порядка когерентности. Для расчетов функции распределения кластеров по размерам и функции их деградации предложена и развивается физическая модель, позволившая получить для многоквантового спектра аналитический результат, учитывающий релаксационные процессы. Получено согласие теоретических и экспериментальных зависимостей скоростей деградации когерентности в адамантане, масштабируемых на квадратный корень из среднего размера кластера. Из сравнения этих зависимостей между собой найдены параметры вышеупомянутых функций.

DOI: 10.31857/S1234567823120091, EDN: ewirns

Процессы возникновения и разрастания динамических корреляций между частицами, и их релаксации, вызываемой различными механизмами деградации, играют фундаментальную роль в физике многих тел. Прежде подобного рода исследования проводились, в целях развития неравновесной статистической механики [1]. Однако в настоящее время их изучение стало необходимым для практической реализации квантовых приборов и технологий [2–4]. В том числе при создании и применении так называемых NISQ-компьютеров [5, 6] (*Noisy intermediate-scale quantum computers*), размер которых ограничен процессами декогерентизации. Например, в работе [7] NISQ-компьютер реализован на динамически коррелированных спинах ядер ^1H в поликристаллическом адамантане. Управление спиновой системой осуществляется методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) с помощью последовательности когерентных радиочастотных (РЧ) импульсов. В условиях эксперимента достигнутый размер регистра составлял 25 спинов.

Среди методов изучения многочастичных динамических корреляций выделяется многоквантовая (МК) ЯМР спектроскопия твердых тел [8, 9]. В МК экспериментах, посредством облучения спиновой си-

стемы последовательностью когерентных РЧ импульсов, исследователи преобразуют гамильтониан межъядерных спин-спиновых взаимодействий (как правило – диполь-дипольный) в некоторый “запланированный” заранее межъядерный спин-спиновый гамильтониан, называемый эффективным. Затем, с его помощью, не только наблюдают развитие многоспиновых корреляций (среди нескольких тысяч спинов) [10–13], но и управляют ростом этих корреляций и их деградацией [8, 14–16]. Несмотря на большое число публикуемых работ, в этой области по-прежнему присутствует множество нерешенных проблем [15, 16]. Одной из центральных (но и наиболее сложных) проблем в области МК спиновой динамики является описание деградации больших МК кластеров в зависимости от размера и квантового числа (порядка когерентности).

В пионерской работе [10] в поликристаллическом адамантане была измерена релаксация компонент МК спектра при увеличении длительности интервала эволюции с гамильтонианом диполь-дипольных взаимодействий (ДДВ), располагавшимся между подготовительным периодом и периодом смешивания. Найдена зависимость скорости декогерентизации от порядка когерентности и от размера среднего кластера динамически коррелированных спинов, который образуется вследствие двухквантового

¹⁾ e-mail: rsa@iph.krasn.ru; ya-andylun2012@yandex.ru

двухспинового взаимодействия на подготовительном периоде и определяется его длительностью.

Первый теоретический анализ этих результатов был дан в работе [17]. Авторы предложили поле от ДДВ со спинами кластера делить на коррелированную и некоррелированную части. Исходя из этого, сигнал от компоненты МК спектра представлен в виде суммы двух слагаемых от спинов, динамике которых определяет или коррелированное поле, или некоррелированное поле, соответственно. Первое слагаемое является функцией от порядка когерентности, а второе – от числа спинов в кластере. Степень коррелированности определяется соотношением амплитуд двух слагаемых.

Несмотря на сходство теоретических зависимостей с результатами, полученными в эксперименте, в рассматриваемой однородной спиновой системе адамантана при высоких температурах предполагаемая гетерофазность искомой сложной временной корреляционной функции (ВКФ) нуждается в обосновании. Более естественным и давно используемым при объяснении динамики ядерной спиновой системы твердого тела является предположение, что локальное поле состоит из двух частей на каждом спине, а не на разных спинах. Так, например, разделение локального поля на некотором выделенном (любом) спине на две компоненты: от ближайших соседей (ячейки) и от более далеких спинов (далекое окружение) впервые позволило дать объяснение характерным особенностям сигнала свободной прецессии (фурье-образ спектра поглощения ЯМР) в твердом теле [18] и добиться корректного их описания.

Выполнив разделение локального поля от ДДВ на каждом из спинов кластера динамически коррелированных спинов на две компоненты [19], мы получили функцию, описывающую деградацию кластера, в виде произведения двух сомножителей от двух вкладов в локальное поле:

$$\Gamma_{KM}(t_1) = \exp(-KB^2t_1^2/2) \exp(-A^2Mt_1^2), \quad (1)$$

где t_1 – длительность интервала эволюции, K – число спинов в кластере, а M – порядок когерентности. Параметр B^2 характеризует некоррелированный вклад в локальное поле на каждом из спинов кластера, независящий от локального поля на других спинах. Параметр же A^2 характеризует среднее по кластеру поле, коррелировано действующее на все спины кластера. Порядок величины параметров B^2 и A^2 определяется вторым моментом спектра автокорреляционной функции одного спина m_2 , но точный их расчет практически невозможен [19]. Поэтому мы их будем полагать далее некоторыми феноменологиче-

скими константами, определяемыми из экспериментальных данных. На основании представления (1) в работе [19] мы выполнили свой анализ экспериментальных зависимостей из работ [10, 11]. Учитывая быстро увеличивающуюся с ростом M погрешность экспериментов (см. рис. 5 из работы [10]), достигающую при больших значениях M величин, близких к 100% и необычную форму приведенных кривых, при обработке эксперимента для извлечения данных нам пришлось ограничиться лишь центральной частью экспериментальных результатов [19].

В описанных выше теоретических подходах, в полученных формулах зависимость скорости деградации кластера от порядка когерентности M есть только у вклада от коррелированного поля, тогда как вклад от некоррелированных полей на спинах кластера не зависит от M , а зависит только от числа спинов в кластере. Дело в том, что в обеих теориях рассматривается деградация на эволюционном периоде под действием ДДВ кластера коррелированных спинов среднего размера $\bar{K}$, образовавшегося на подготовительном периоде. На самом же деле в конце подготовительного периода матрица плотности является суммой кластеров разного размера K , каждый из которых будет деградировать со своей скоростью на эволюционном периоде.

В настоящей работе мы рассчитаем зависимость от M скорости декогерентности компонент МК спектра, учтя образование на подготовительном периоде кластеров разного размера. Для задания весов кластеров разного размера используем функцию распределения, предложенную нами в работах [20–24] на основании простой модели, соответствующей эксперименту и приводящей к экспоненциальному росту среднего размера кластера коррелированных спинов при увеличении длительности подготовительного периода.

Теперь представим наблюдаемый МК спектр $G_M(T, t_1)$ в виде суммы МК спектров g_{KM} кластеров разного размера K , образовавшихся на подготовительном периоде длительностью T и деградировавших затем на эволюционном периоде длительности t_1 :

$$G_M(T, t_1) = \sum_{K=|M|}^{\infty} g_{KM} \Gamma_{KM}(t_1) P(K, T), \quad (2)$$

где $\Gamma_{KM}(t_1)$ – функция деградации (1), а $P(K, T)$ представляет собой распределение по числу кластеров с K спинами. Следуя комбинаторной теории

[8], для МК спектра отдельного кластера используем функцию Гаусса:

$$g_{KM} = \frac{1}{\sqrt{\pi K}} \exp\left(-\frac{M^2}{K}\right). \quad (3)$$

В качестве распределения кластеров по размерам возьмем функцию

$$P(K, T) = \frac{(th^2(T/\sqrt{2}))^{K-1} K}{ch^4(T/\sqrt{2})}, \quad (4)$$

полученную в работах [22–24] на основании простой модели роста кластеров. Она удовлетворяет условию нормировки: $\sum_{K=1}^{\infty} P(K, T) = 1$ и обеспечивает для среднего размера кластера:

$$\bar{K}_0(T) = \sum_{K=1}^{\infty} K P(K, T) = 1 + 2sh^2(T/\sqrt{2}) \quad (5)$$

экспоненциальный рост $\bar{K}_0(T) \sim \exp(\sqrt{2}T)/2$ (при $T \gg 1$), характерный для плотных спиновых систем, таких как алмаantan или флюорит [20, 21]. (Здесь и ниже время выражено в единицах обратного второго момента $(1/\sqrt{m_2})$ автокорреляционной функции.)

Совершенно очевидно, что при больших временах T основной вклад в МК спектр, определяемый суммой (2), будут вносить большие кластеры ($K \gg \gg 1$). Используя формулу (5), позволяющую выразить гиперболические функции в соотношении (4) через $\bar{K}_0(T)$, формулы преобразования гиперболических функций и второй замечательный предел, несложно получить для больших значений K :

$$\begin{aligned} P(K, T) &= K \left(\frac{2}{\bar{K}_0 + 1} \right)^2 \left(\frac{\bar{K}_0 - 1}{\bar{K}_0 + 1} \right)^{K-1} \approx \\ &\approx K \left(\frac{2}{\bar{K}_0 + 1} \right)^2 \exp\left(-2\frac{K-1}{\bar{K}_0 + 1}\right) \sim \\ &\sim K \left(\frac{2}{\bar{K}_0} \right)^2 \exp\left(-2\frac{K}{\bar{K}_0}\right). \end{aligned} \quad (6)$$

Подставим (1) и (6) в (2). Заменив суммирование интегрированием с равным нулю нижним пределом, что справедливо по крайней мере для больших кластеров, и вынеся вклад от коррелированного поля за знак интеграла, вычислим интеграл [25]

$$\begin{aligned} G_M(T, t_1) &= \exp(-A^2 M^2 t_1^2) \cdot \left(\frac{2}{\bar{K}_0} \right)^2 \times \\ &\times \int_0^{\infty} \exp\left\{-K \frac{2}{\bar{K}_0} (1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4) - \frac{M^2}{K}\right\} \sqrt{K/\pi} dK = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2(q)^{3/2}} (1 + 2|M|\sqrt{q}) \exp(-2|M|\sqrt{q}) \exp(-A^2 M^2 t_1^2). \quad (7)$$

Здесь $q = (2/\bar{K}_0)(1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4)$.

Вследствие деградации суммарная интенсивность МК спектра

$$N(T, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} G_M(T, t_1) dM \quad (8)$$

уменьшается с ростом t_1 . Форму МК спектра описывает функция, получающаяся из (7) после нормировки на $N(T, t_1)$. В частности, при отсутствии коррелированного вклада в локальное поле (т.е. при значении константы $A = 0$) получаем универсальную форму МК спектра

$$\begin{aligned} f_1(M) &= G_M(T, t_1)/N(T, t_1) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\bar{K}_1}} \left(1 + 2\sqrt{\frac{2M^2}{\bar{K}_1}} \right) \exp\left(-2\sqrt{\frac{2M^2}{\bar{K}_1}}\right), \end{aligned} \quad (9)$$

масштабируемую на средний размер кластера коррелированных спинов,

$$\bar{K}_1 = 2\langle M^2 \rangle = \bar{K}_0/(1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4), \quad (10)$$

полученный при учете деградации только от независимого вклада в локальное поле и равный удвоенному второму моменту МК спектра. Хотя соотношение среднего размера кластера со вторым моментом спектра $\langle M^2 \rangle$ такое же, как у функции Гаусса (3), задаваемая соотношением (9) форма спектра существенно отличается от гауссовской. Полученная экспоненциальная зависимость спектра от M линейна в отличие от квадратичной гауссовской зависимости: M^2 . Кроме того, найденный спектр спадает в e раз при $M_e \approx 1.05\sqrt{\langle M^2 \rangle}$, тогда как для гауссовской функции падение в e раз происходит при значении $M_e = \sqrt{2\langle M^2 \rangle}$. Тем самым, развиваемая в настоящей работе модель, позволила объяснить экспоненциальную форму МК спектров, наблюдаемую в экспериментах [14, 26].

Найденный для МК спектра результат (7) позволяет рассчитать скорость релаксации спектральной компоненты с порядком когерентности M , определяемую через время $\tau = t_1$, при котором ее амплитуда уменьшается в “ e ” раз. Эта скорость релаксации впервые измерялась еще при экспериментах [10] с целью изучения зависимости скорости деградации кластера от порядка когерентности M . Таким образом, из (7) следует уравнение:

$$\frac{G_M(T, t_1 = 0)}{G_M(T, t_1 = \tau)} = e =$$

$$= \exp\left(2\sqrt{qM^2} - 2\sqrt{q_0M^2} + A^2M^2\tau^2\right) \times \frac{1 + 2\sqrt{q_0M^2}}{1 + 2\sqrt{qM^2}} \left(\frac{q}{q_0}\right)^{3/2}, \quad (11)$$

где $q_0 = 2/\bar{K}_0$. Для решения уравнения (11) в нем целесообразно перейти к новым переменным, “масштабирующим” координатные оси:

$$m^2 = q_0M^2 = 2M^2/\bar{K}_0; \quad (12)$$

$$z = \sqrt{q/q_0} = (1 + \bar{K}_0B^2\tau^2/4)^{1/2}.$$

В новых переменных $A^2M^2\tau^2 = 2\alpha m^2(z^2 - 1)$ (где $\alpha = A^2/B^2$) и уравнение (11) примет вид при $m \geq 0$:

$$\exp\{2m(z - 1) + 2\alpha m^2(z^2 - 1)\} \frac{1 + 2m}{1 + 2mz} z^3 = e. \quad (13)$$

Приближенные решения уравнения (13) для больших и малых значений m могут быть найдены аналитически. Так при $m^2 \ll 1$ находим:

$$R(m) = \frac{1}{\sqrt{\bar{K}_0}B\tau} = \frac{1}{2\sqrt{z^2 - 1}} \approx$$

$$\approx \frac{1}{2\sqrt{e^{2/3} - 1}} [1 + m^2(1 + \alpha)\frac{2}{3}e^{2/3}] =$$

$$= 0.5136 [1 + 1.298m^2(1 + \alpha)]. \quad (14)$$

Если $m^2 \gg 1$, то для решения уравнения (13) находим:

$$R(m) \approx \frac{1}{2\sqrt{2\delta_0}} \left(1 + \frac{1}{2m(1 + 2\alpha m)} - \frac{\delta_0}{4}\right), \quad (15)$$

$$\delta_0 = \frac{1/m}{1 + 2\alpha m + \sqrt{(1 + 2\alpha m)^2 + 2\alpha}}, \quad (16)$$

где δ_0 – решение, обеспечивающее равенство 1 показателя экспоненты в (13). В частности, при $m^2 \gg 1$ и $\alpha = 0$:

$$R(m) = \frac{1}{\sqrt{\bar{K}_0}B\tau} = \frac{\sqrt{m}}{2} \left(1 + \frac{3}{8m}\right), \quad (17)$$

а при $m^2 \gg 1$ и $m\alpha \gg 1$:

$$R(m) \approx \frac{\sqrt{\alpha m}}{\sqrt{2}} \approx \left(1 + \frac{1}{4\alpha m} + \frac{1}{16\alpha m^2} \left(1 + \frac{2.5}{\alpha}\right)\right). \quad (18)$$

Найденное численно решение уравнения (13) при различных значениях α приведено на рис. 1 в масштабированных координатах:

$$R(m) = \frac{1}{\sqrt{\bar{K}_0}B\tau} \text{ в зависимости от } m = \sqrt{2M^2/\bar{K}_0}. \quad (19)$$

Приведенные там же на рисунке приближенные зависимости, рассчитанные по формуле (15), хорошо описывают результаты точных расчетов при больших m . Появление дополнительного вклада в спиновую релаксацию кластеров, возникающего от воздействия “коррелированного поля” (т.е. $A \neq 0$), приводит к убыстрению скорости роста R в зависимости от M .

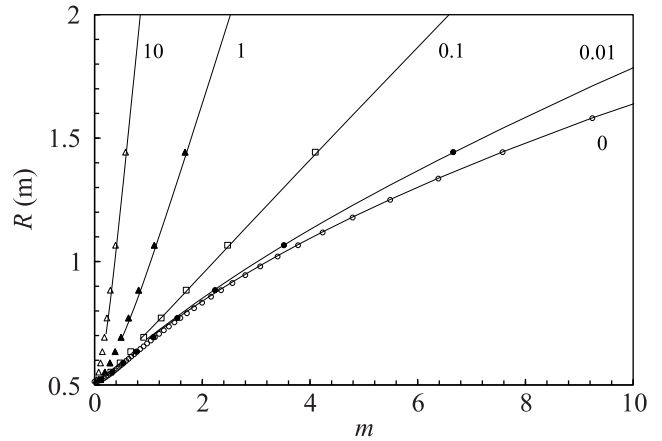


Рис. 1. Масштабированная скорость релаксации (декогерентизации) компоненты МК спектра $R(m) = \frac{1}{\sqrt{\bar{K}_0}B\tau}$ как функция масштабированного порядка когерентности $m = \sqrt{2M^2/\bar{K}_0}$ при разных значениях параметра $\alpha = A^2/B^2$, показанных цифрами у кривых. Линиями показаны приближенные зависимости (15), тогда как соответствующие результаты численного решения уравнения (13) показаны фигурами

Полученные зависимости от порядка когерентности M скоростей релаксации R компонент МК спектра демонстрируют с ростом M переход от квадратичной зависимости $R(m) \sim M^2$ (14) к корневой $R(m) \sim \sqrt{M}$ (17). Подобное замедление роста скорости релаксации наблюдалось экспериментально (см. рис. 5 из [10]). Именно для объяснения этого эффекта в работе [17] предложена формула с суммой двух вкладов в релаксацию. Для более обстоятельного сравнения предлагаемой нами теории с экспериментом данные (их часть при $M \geq 0$), приведенные на рис. 5 из работы [10], были оцифрованы и перестроены на рис. 2 в координатах, масштабируемых на $\sqrt{\bar{K}}$. По вертикальной оси приведены экспериментальные скорости релаксации, деленные на величину $\sqrt{\bar{K}}$. По горизонтальной оси – $m_g = \sqrt{2M^2/\bar{K}}$. Отметим, что пропорциональность скорости релаксации величине $\sqrt{\bar{K}}$ была обнаружена экспериментально в работе [10]. Из этой же работы нами взяты значения $\bar{K}$ при разных длительностях T , которые вычислялись через ширины МК спектров на половине вы-

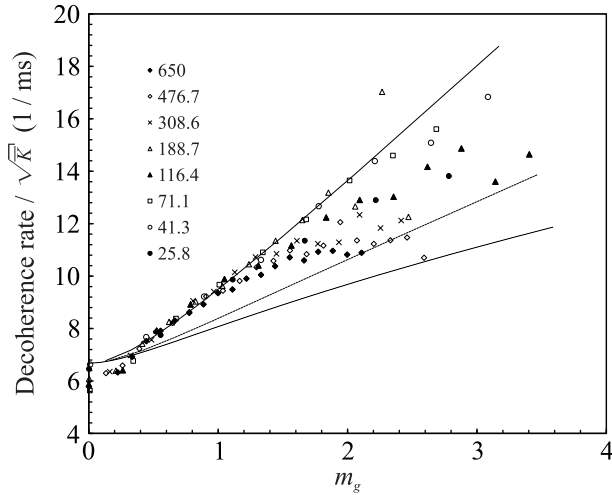


Рис. 2. Экспериментальные скорости релаксации (декогерентизации) [10], деленные на $\sqrt{K}$, как функции порядка когерентности M , взятого в виде $m_g = \sqrt{2M^2/K}$. Результаты, полученные при разных средних размерах кластеров $\bar{K} = \bar{K}_{0g}$ (колонка цифр на рисунке), показаны разными фигурами. Теоретические результаты, найденные численным решением уравнения (13), показаны линиями в виде функций $13R(0.7134 \cdot m_g)/\text{мс}$ при трех значениях параметра α : $\alpha = 0$ (пунктирная линия), $\alpha = 0.1$ (штриховая линия) и $\alpha = 0.5$ (сплошная линия)

соты σ . Авторы полагали, что спектр имел гауссову форму, задаваемую формулой (3), и, следовательно,

$$\bar{K} = \bar{K}_{0g} = \frac{1}{\ln 2} \left(\frac{\sigma}{2} \right)^2. \quad (20)$$

Однако, полученное нами выше выражение (9) для формы спектра влечет иное соотношение между $\bar{K} = \bar{K}_0$ и этой шириной:

$$\bar{K} = \bar{K}_0 = 2 \left(\frac{2}{x} \right)^2 \left(\frac{\sigma}{2} \right)^2. \quad (21)$$

Здесь $x \approx 1.68$ решение уравнения $e^x = 2(1+x)$. Таким образом, приходим к соотношению:

$$\bar{K}_{0g}/\bar{K}_0 \approx 0.509 = (0.7134)^2. \quad (22)$$

На рисунке 2, помимо экспериментальных, приведены теоретические зависимости скорости релаксации когерентных состояний, полученные численным решением уравнения (13) при трех значениях параметра α : $\alpha = 0$ (пунктирная линия), $\alpha = 0.1$ (штриховая линия) и $\alpha = 0.5$ (сплошная линия). Учитывая соотношение (22) и взятое из эксперимента значение параметра $B = 9.27 \cdot 10^{-3} (1/\text{мкс})$, эти зависимости представлены функцией $R(0.7134 \cdot m_g)13/\text{мс}$. Поясним ее вид: во-первых, теоретическая скорость $R(m)$

(рис. 1) является функцией от $m = \sqrt{2M^2/\bar{K}_0}$, тогда как экспериментальная скорость на рис. 2 – функция от $m_g = \sqrt{2M^2/\bar{K}_{0g}}$. Между аргументами соотношение: $m = \sqrt{\bar{K}_{0g}/\bar{K}_0} m_g = 0.7134 m_g$. Во-вторых, мы хотим, чтобы при $M = 0$ теоретическая скорость релаксации (14) $R(0) = \frac{1}{\sqrt{\bar{K}_0} B \tau} = 0.5136$ совпала с экспериментальной $\frac{1}{\tau \sqrt{\bar{K}_{0g}}} \approx 6.68 \frac{1}{\text{мс}}$. Отсюда находим значения коэффициента $13 \frac{1}{\text{мс}} \approx \frac{B \sqrt{\bar{K}_0}}{\sqrt{\bar{K}_{0g}}}$ и параметра $B \approx 0.7134 \cdot 13 \frac{1}{\text{мс}} = 9.2742 \frac{1}{\text{мс}}$.

При масштабировании данных на рис. 2 мы исходили из результата (7). Ранее в МК спектроскопии масштабирование данных выполнялось в работах [15, 26, 27]. В работе [26] выполнено масштабирование каждого МК спектра, получаемого при увеличении времени приготовления, на его ширину (пусть и с некоторыми оговорками). В работах [15, 27] изучалось влияние возмущения, добавляемого на подготовительном периоде, и проведены масштабирования роста среднего размера кластера [27] и затухания суммарной интенсивности МК спектра [15]. Для масштабирования взяты степенные функции с подбираемыми показателями степеней.

Как видно из рис. 2, зависимость с $\alpha = 0.5$ несколько лучше согласуется с экспериментальными результатами [10], чем при других использованных нами значениях α . Однако, хорошее согласие с экспериментом наблюдается в области значений m порядка единицы, тогда как при больших m теоретическая зависимость от m сильнее, чем экспериментальная. По-видимому, это свидетельствует о том, что представление функцией Гаусса от M вклада в деградацию от коррелированного поля (1) является неточным для больших значений M , т.е. для больших кластеров. Следует учесть топологию кластеров, что приведет к замене одной функции релаксации на сумму функций, зависящих от размера кластера и отношения его поверхности к объему [28]. В качестве примера негауссовой зависимости скорости релаксации от M укажем работу [29]. В этой работе выполнен численный расчет релаксации компонент МК спектра для системы с большим числом эквивалентных спинов. Поскольку константы ДДВ одинаковы между всеми спинами, то остается только коррелированный вклад в локальное поле. В работе показано, что время релаксации уменьшается при увеличении числа спинов и порядка МК когерентности. При этом скорость изменения замедляется при больших значениях M .

Таким образом, развиваемая в предлагаемой работе физическая модель, впервые позволила учесть

как распределение кластеров динамически коррелированных спинов по размеру, так и исследовать их деградацию под действием возмущения. Ранее в работе [19] мы анализировали зависимость скорости релаксации от порядка когерентности M в модели одного кластера, имеющего некоторый средний размер. В частности, мы нашли для величины коррелированного вклада, единственно отвечающего при таком подходе за зависимость от M , значение: $A^2 = 205(1/\text{мс})^2$ (при $T = 660 \text{ мкс}$). В настоящей же работе, выполненный учет распределения кластеров по размерам (2), позволил рассчитать вклад некоррелированного поля из (1) в зависимость скорости релаксации от величины M . Выделение этого вклада привело к уменьшению вклада второго сомножителя в (1) до величины $A^2 \approx 43/(\text{мс})^2$. Таким образом, подтверждена гипотеза авторов работы [10] о возможной связи наблюдаемой зависимости скорости релаксации от порядка M с наличием кластеров разного размера. Наконец, в настоящей работе показано, что сопоставление предлагаемой теории с экспериментом открывает, возможность “численного” разделения коррелированного и некоррелированного вкладов, как в локальное поле на ядрах многоспинового кластера, так и в скорость декогерентизации.

Благодарим К. В. Зобова за помощь в оцифровке экспериментальных кривых из работы [10] и численном решении уравнения (13).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема # 122040500060-4).

1. P. Gaspard, *From dynamical system theory to nonequilibrium thermodynamics, Symposium Henri Poincare, Proceedings*, ed. by P. Gaspard, M. Henneaux, and F. Lambert, International Solvay Institute for Physics and Chemistry, Brussels (2007), p. 97.
2. Д. Прескилл, *Квантовая информация и квантовые вычисления*, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, М., Ижевск (2008), т. 1.
3. D. Suter and G. A. Álvarez, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 041001 (2016).
4. L. Pezze, A. Smerzi, M. K. Oberthaler, R. Schmied, and P. Treutlein, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 035005 (2018).
5. J. Preskill, *Quantum* **2**, 79 (2018).

6. Bin Cheng, Xiu-Hao Deng, Xiu Gu, Yu He et al. (Collaboration), arXiv: 2303.04061 (2023).
7. T. Kusumoto, K. Mitarai, K. Fujii, M. Kitagawa, and M. Negoro, *npj Quantum Inf.* **7**, 94 (2021).
8. J. Baum, M. Munovitz, A. N. Garroway, and A. Pines, *J. Chem. Phys.* **83**, 2015 (1985).
9. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, М. (1990).
10. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090501 (2004).
11. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. A* **74**, 062319 (2006).
12. G. Cho, P. Cappelaro, D. G. Cory, and C. Ramanathan, *Phys. Rev. B* **74**, 224434 (2006).
13. C. M. Sanchez, R. H. Acosta, P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and A. K. Chattah, *Phys. Rev. A* **90**, 042122 (2014).
14. G. A. Álvarez and D. Suter, *Phys. Rev. A* **84**, 012320 (2011).
15. F. D. Domínguez, M. C. Rodríguez, R. Kaiser, D. Suter, and G. A. Alvarez, *Phys. Rev. A* **104**, 012402 (2021).
16. C. M. Sanchez, A. K. Chattah, and H. M. Pastawski, *Phys. Rev. A* **105**, 052232 (2022).
17. A. Fedorov and L. Fedichkin, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 3217 (2006).
18. А. А. Лундин, Б. Н. Провоторов, *ЖЭТФ* **70**, 1047 (1976).
19. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **139**, 519 (2011).
20. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **130**, 1047 (2006).
21. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *Химическая физика* **27**, 18 (2008).
22. А. А. Лундин, В. Е. Зобов, *ЖЭТФ* **147**, 885 (2015).
23. V. E. Zobov and A. A. Lundin, *Appl. Magn. Res.* **52**, 879 (2021).
24. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **162**, 778 (2022).
25. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды, раздел 2.3.16(2)*, Наука, М. (1981).
26. S. Lacelle, S. Hwang, and B. Gerstein, *J. Chem. Phys.* **99**, 8407 (1993).
27. G. A. Alvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* **349**, 846 (2015).
28. В. Е. Зобов, *ТМФ* **165**, 242 (2010).
29. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk, *J. Chem. Phys.* **134**, 034102 (2011).

Гигантское пространственное перераспределение электронов в широкой квантовой яме, индуцированное квантующим магнитным полем

С. И. Дорожкин⁺¹⁾, А. А. Капустин⁺, И. Б. Федоров⁺, В. Уманский*, Ю. Х. Смет[×]

⁺Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

*Department of Physics, Weizmann Institute of Science, 76100 Rehovot, Israel

[×]Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstrasse 1, D-70569 Stuttgart, Germany

Поступила в редакцию 2 мая 2023 г.

После переработки 19 мая 2023 г.

Принята к публикации 19 мая 2023 г.

В образцах полевых транзисторов на основе гетероструктур GaAs/AlGaAs с электронной системой в одиночной квантовой яме GaAs шириной 50 нм обнаружен стимулированный квантующим магнитным полем переход из двухслойного состояния системы в нулевом магнитном поле в однослойное при заполнении нижнего уровня Ландау. В отличие от результатов для квантовой ямы шириной 60 нм (S. I. Dorozhkin, A. A. Kapustin, I. B. Fedorov, V. Umansky, and J. H. Smet, Phys. Rev. B **102**, 235307 (2020)) однослойное состояние наблюдается не только в несжимаемых состояниях электронной системы на факторах заполнения единица и двойка, реализующих состояния квантового эффекта Холла, но и в сжимаемых состояниях между этими факторами заполнения. Установлено пространственное расположение однослойной системы в квантовой яме, которое оказалось независимым от распределения электронов по слоям в слабом магнитном поле, и дано качественное объяснение этому наблюдению. Обнаруженный переход, предположительно, объясняется отрицательной сжимаемостью двумерных электронных систем, обусловленной обменно-корреляционными вкладами в электрон-электронное взаимодействие.

DOI: 10.31857/S1234567823120108, EDN: ewmklk

Стимулированное перпендикулярным магнитным полем перераспределение электронов между слоями двухслойной электронной системы (ЭС) при больших значениях факторов заполнения уровней Ландау является хорошо установленным фактом. Оно реализуется в двухслойных системах, создаваемых как в двойных [1, 2], так и широких [3] квантовых ямах и может быть описано в рамках приближения Хартри (см., например, работу [4] и ссылки в ней). Это перераспределение обусловлено магнетоосцилляциями химического потенциала в слоях, асинхронными в случае различной плотности электронов в них. Такой механизм обычно приводит к частичному изменению плотности электронов в слоях, сохраняя двухслойное состояние ЭС. В недавней работе [5] на образцах с одиночными квантовыми ямами шириной 60 нм за счет применения оригинальной емкостной методики нами были обнаружены стимулированные магнитным полем возвратные переходы между двухслойным и однослойным состояниями ЭС. Однослойные состояния реализовывались в состояниях цело-

численного квантового эффекта Холла (КЭХ), возникавших при равенстве полной плотности электронов в ЭС числу одноэлектронных состояний на одном или двух спиновых подуровнях, т.е. при значениях полного фактора заполнения ν единица и двойка. В существующих теориях квантового эффекта Холла в двухслойных системах такая ситуация может возникать при формировании когерентных межслоевых состояний (см. обзорную статью [6]) или локализации электронов в одном из слоев [7]. В обоих этих случаях эффект обусловлен обменным и корреляционным вкладами в электрон-электронное взаимодействие. В первом случае центр тяжести многоэлектронной волновой функции находится между слоями, а во втором случае – в одном из слоев. До появления работы [5] экспериментальных исследований влияния перпендикулярного магнитного поля на распределение электронной плотности в направлении оси роста гетероструктур в номинально двухслойных электронных системах не проводилось. Отметим только моделирование такого изменения в работе [8], привлекавшееся для объяснения существования состоя-

¹⁾e-mail: dorozh@issp.ac.ru

ний КЭХ на факторах заполнения единица и двойка в широком диапазоне экспериментальных параметров.

В данной работе на образцах с меньшей шириной квантовой ямы (50 нм) по сравнению с 60 нм в работе [5] нами обнаружен переход из двухслойного состояния в нулевом магнитном поле в однослойное при полном факторе заполнения $\nu \leq 2$, соответствующее концентрации всех электронов в одном слое независимо от соотношения между плотностями электронов в слоях. Это наблюдение демонстрирует существование индуцированного магнитным полем однослойного состояния не только в состояниях КЭХ, но и в сжимаемых состояниях ЭС, возможность чего до сих пор даже не рассматривалась. Дано качественное объяснение индуцированного магнитным полем перехода в однослойное состояние и наблюдаемой асимметрии в локализации электронной плотности в квантовой яме.

Эксперименты выполнены на двух образцах, изготовленных из одной пайбы гетероструктуры GaAs/AlGaAs, выращенной методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Электронная система в исследованных образцах создавалась в квантовой яме GaAs шириной 50 нм. Профиль потенциальной ямы и заполнение ее электронами изменялись при помощи двух затворных напряжений, прикладываемых между затворами, расположенными по разные стороны квантовой ямы, и легированным контактом к электронной системе (см. рис. 1а). Нижний затвор (BG) создавался в процессе роста гетероструктуры и представлял собой слой сильно легированного GaAs. Верхний тонкопленочный затвор Шоттки (TG) наносился на поверхность гетероструктуры, имел площадь $S = 0.4 \text{ мм}^2$ и покрывал около 95 % площади ЭС. Расстояние между нижним (верхним) затвором и нижней (верхней) стенкой квантовой ямы составляло $d_{bg} = 1000 \text{ нм}$ ($d_{tg} = 120 \text{ нм}$). При нулевых затворных напряжениях около верхней стенки квантовой ямы возникала двумерная электронная система (TL) за счет стекания туда электронов из слоя селективного легирования (DL), который создавался в барьерном слое AlGaAs за спейсором шириной 91 нм, расположенным выше квантовой ямы. При приложении положительного затворного напряжения на нижний затвор второй двумерный слой (BL) образовывался около нижней стенки ямы, как это показано на рис. 1а. Приводимые в этой работе результаты были получены при нулевом напряжении на верхнем затворе ($V_{tg} = 0$). Образцы имели латеральную геометрию холловских мостиков. В эксперименте могли одновременно

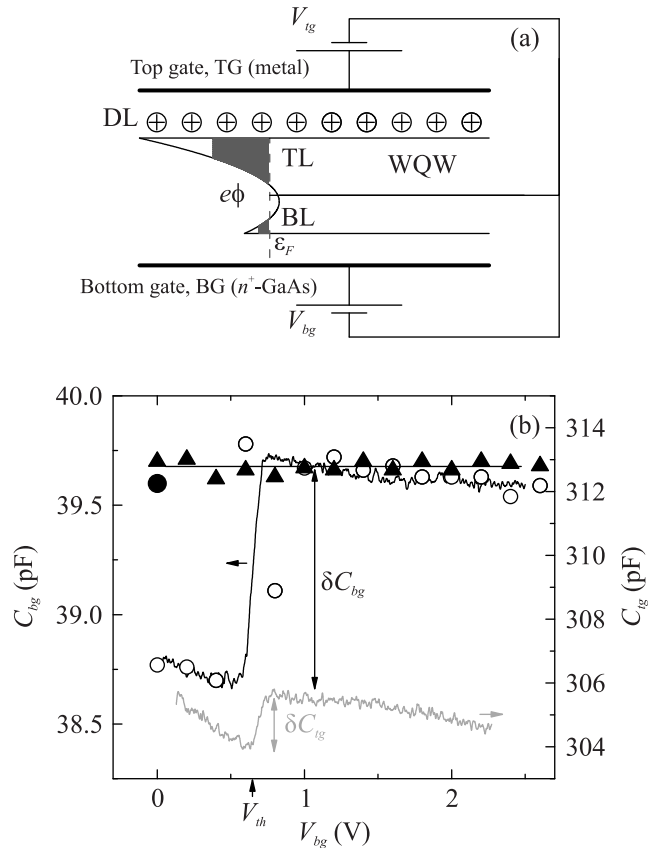


Рис. 1. (а) – Схема полевого транзистора при $V_{bg} > V_{th}$ с двумя слоями электронов (TL и BL), расположенными около противоположных стенок квантовой ямы (WQW). DL – слой положительно заряженных доноров. (б) – Зависимости емкостей между электронной системой и нижним (C_{bg} , темная сплошная линия, левая шкала) и верхним (C_{tg} , светлая линия, правая шкала) затворами от напряжения V_{bg} на нижнем затворе, измеренные в нулевом магнитном поле при напряжении на верхнем затворе $V_{tg} = 0 \text{ В}$ и температуре $T = 1.5 \text{ К}$. Значками отмечены значения емкости C_{bg} , полученные из кривых магнетоемкости (см. рис. 3 и текст статьи) в нулевом магнитном поле (окружности) и при значении полного фактора заполнения уровней Ландау $\nu = 3/2$ (треугольники). Сплошным кружком показано значение емкости, вычисленное для $\nu = 3/2$ при $V_{bg} = 0$ по формуле (1). Стрелкой отмечено значение затворного напряжения $V_{th} \approx 0.65 \text{ В}$, соответствующее образованию второго слоя электронов

измеряться емкости между обоими затворами и электронной системой, а также сопротивление и холловское сопротивление образца. Детали экспериментальной методики описаны в работах [9, 5], включая способ определения паразитных величин емкостей. Измерения емкостей между различными затворами и электронной системой позволяют ха-

рактизовать распределение электронов поперек квантовой ямы, а также определять плотность электронов в слоях из периодичности квантовых магнетоосцилляций емкости [9]. Измерения межподзонных магнетоосцилляций сопротивления [10, 11], наблюдаемых в слабых магнитных полях и при сравнительно высоких температурах (4.2 К в нашем эксперименте), позволяли определять разность плотностей электронов в двух подзонах размерного квантования. Эксперименты были выполнены в интервале температур от 0.5 до 4.2 К в криостате с ^3He в качестве хладагента. Магнитное поле с индукцией до 11 Тл создавалось сверхпроводящим соленоидом и было направлено перпендикулярно плоскости квантовой ямы.

Экспериментальные свидетельства заполнения второго слоя в нулевом и слабых магнитных полях представлены на рис. 1б и 2. В первую очередь это скачки емкостей между затворами и электронной системой при $V_{bg} = V_{th}$, показанные на рис. 1б. Из величины скачка δC_{bg} в предположении постоянной величины диэлектрической проницаемости гетероструктуры прямо определяется изменение расстояния Δd_{bg} от нижнего затвора до слоя, выполняющего роль второй обкладки соответствующего плоского конденсатора: $\Delta d_{bg} = -d_{bg}\delta C_{bg}/C_{bg} \approx 25$ нм. Учитывая, что аналогичная величина, определяемая из скачка емкости δC_{tg} : $\Delta d_{tg} = -d_{tg}\delta C_{tg}/C_{tg}$, не превышает 0.7 нм, естественная интерпретация скачка в C_{bg} на рис. 1б состоит в образовании второго слоя электронов около нижней стенки квантовой ямы, так что расстояние между слоями $d \sim \Delta d_{bg} \approx 25$ нм. Такая интерпретация подтверждается изменениями магнетоемкости в слабых магнитных полях, показанными на рис. 2а и б. Действительно, в соответствии с расчетами для модельной двойной квантовой ямы и экспериментом [12, 5] в случае существования только одного слоя нормированные значения магнетоемкостей $C_{bg,n0} = C_{bg}(B)/C_{bg}(B=0)$ и $C_{tg,n0} = C_{tg}(B)/C_{tg}(B=0)$ между электронной системой и разными затворами в отсутствие резистивных эффектов должны совпадать, как это и наблюдается на кривых на рис. 2а, измеренных при $V_{bg} = 0.2$ В < V_{th} . При $V_{bg} = 1.0$ В > V_{th} (см. рис. 2б) емкостные кривые $C_{tg,n0}$ и $C_{bg,n0}$ в слабых магнитных полях демонстрируют магнетоосцилляции разных периодов, из которых может быть определена плотность электронов в слое, ближайшем к соответствующему затвору [9]. Такие исследования, выполненные на подобных образцах с квантовой ямой шириной 60 нм [9], показали, что в двухслойном состоянии ($V_{bg} > V_{th}$, слабое

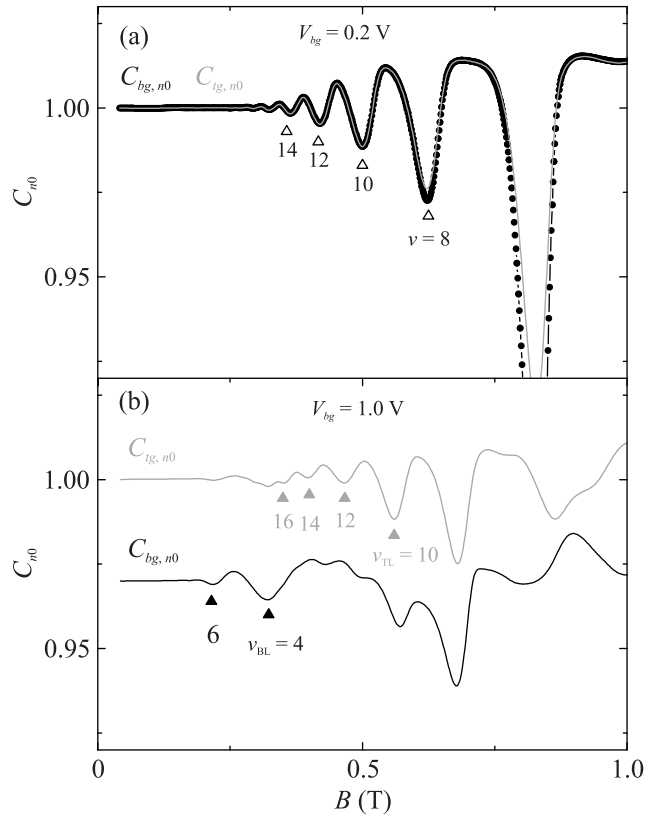


Рис. 2. Нормированные магнетоемкости $C_{bg,n0} = C_{bg}(B)/C_{bg}(B=0)$ (темные кривые) и $C_{tg,n0} = C_{tg}(B)/C_{tg}(B=0)$ (светлые кривые) в случае заполнения одного (а) – ($V_{bg} < V_{th}$) и двух (б) – ($V_{bg} > V_{th}$) слоев электронов. На панели (б) темная кривая $C_{bg,n0}$ для ясности смещена вниз на 0.03. Минимумы в емкостях, отмеченные треугольниками, соответствуют указанным около них факторам заполнения в однослойной системе (ν , открытые символы, рис. 2а), в верхнем (ν_{TL} , светлые сплошные символы, рис. 2б) и нижнем (ν_{BL} , темные сплошные символы, рис. 2б) слоях двухслойной электронной системы

магнитное поле), основным эффектом увеличения V_{bg} является возрастание плотности электронов в нижнем слое. Одновременно наблюдается небольшое уменьшение плотности в верхнем слое. Такое поведение плотностей электронов в двухслойных системах довольно хорошо известно (для случая двойных квантовых ям см., например, работу [13]), и связано с отрицательным вкладом в сжимаемость электронов, большим по модулю в слое меньшей плотности.

Основным результатом этой работы является наблюдение перехода изучаемой системы при $V_{bg} > V_{th}$ из двухслойного состояния в слабые магнитных полях в однослойное состояние в сильных полях, в результате которого в системе остается единственный

электронный слой, локализованный около верхней стенки квантовой ямы, как это было в однослойной системе при $V_{bg} < V_{th}$. О таком переходе свидетельствуют результаты измерений магнетоемкости C_{bg} , приведенные на рис. 3 в функции обратной величины ν^{-1} полного фактора заполнения $\nu = n_t/N_0$, где $N_0 = eB/hc$ – вырожденность одного спинового подуровня. Величина $\nu^{-1} = eB/hcn_t$ пропорциональна магнитному полю B с коэффициентом пропорциональности, определяемым полной плотностью электронов n_t . На рисунке 3 приведены 4 из 14 кри-

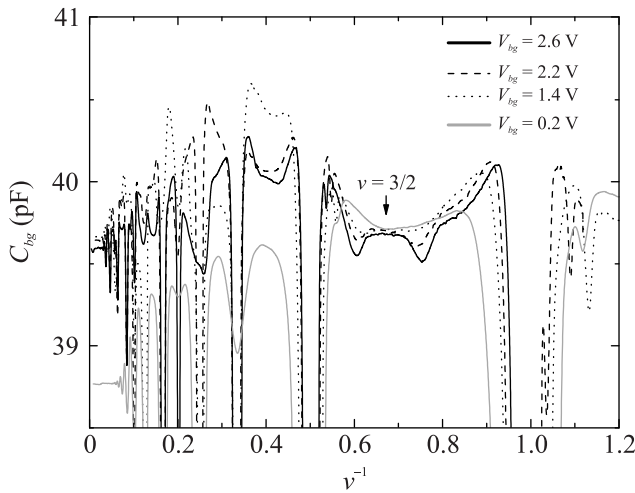


Рис. 3. Четыре репрезентативные кривые магнетоемкости, представленные в функции обратной величины фактора заполнения $\nu^{-1} = eB/hcn_t$, пропорциональной магнитному полю. Различные кривые измерены при $V_{tg} = 0$ В и различных затворных напряжениях V_{bg} , указанных на рисунке (и, соответственно, различных плотностях электронов n_t). Основным результатом, демонстрируемым этими данными, является независимость емкости $C_{bg}(\nu^{-1} \approx 2/3)$, измеренной при факторе заполнения $\nu = 3/2$, от напряжения на нижнем затворе V_{bg} , несмотря на наличие скачка емкости в нулевом магнитном поле (сравни светлую сплошную кривую с тремя другими, а также см. рис. 1)

вых, измеренных в одной экспериментальной серии при $V_{tg} = 0$ В и различных значениях V_{bg} из интервала 0–2.6 В. Ключевым экспериментальным результатом, демонстрируемым этим рисунком, является совпадение значений емкостей, измеренных при всех значениях V_{bg} (и n_t), наблюдаемое в окрестности $\nu^{-1} = 2/3$ ($\nu = 3/2$), несмотря на их различие при $\nu^{-1} = 0$ для случаев $V_{bg} < V_{th}$ и $V_{bg} > V_{th}$. Этот факт был установлен для всех 14 значений V_{bg} из исследованного интервала, что демонстрируется совокупностью экспериментальных точек, показанных значками на рис. 1b. Такая независимость величины

емкости C_{bg} , измеренной при $\nu = 3/2$, от V_{bg} заставляет предположить, что в соответствующих магнитных полях электронная система является однослойной, причем оказывается локализованной так же, как и при $V_{bg} = 0$, т.е. около верхней стенки квантовой ямы. Для подтверждения этой гипотезы, а также установления области существования однослойного состояния по магнитному полю мы выполнили сравнение магнетоемкостных кривых $C_{bg,n}(B)$ и $C_{fg,n}(B)$, полученных нормировкой на значения емкостей при $\nu = 3/2$: $C_{j,n}(B) = C_j(B)/C_j(\nu = 3/2)$, где индекс j означает bg или tg. Соответствующие данные приведены на рис. 4. Независимо от величин

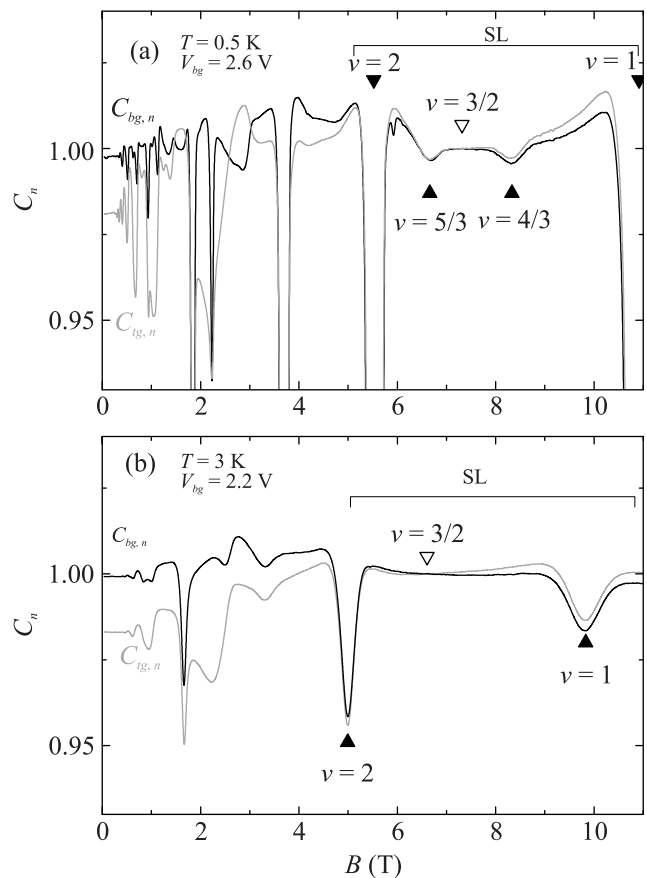


Рис. 4. Сравнение нормированных значений магнетоемкостей $C_{bg,n}(B) = C_{bg}(B)/C_{bg}(\nu = 3/2)$ (темные кривые) и $C_{fg,n}(B) = C_{fg}(B)/C_{fg}(\nu = 3/2)$ (светлые кривые), измеренных при $V_{tg} = 0$ В и $V_{bg} = 2.6$ В, $T = 0.5$ К (а) и $V_{bg} = 2.2$ В, $T = 3$ К (б). Треугольниками отмечены значения факторов заполнения ν , обсуждаемые в тексте. Горизонтальными скобками с аббревиатурой SL отмечены области существования однослойного состояния электронной системы

ны затворного напряжения мы наблюдаем практическое совпадение нормированных емкостей, измерен-

ных с использованием различных затворов, в сильных магнитных полях. Такое совпадение имеет место, начиная с магнитного поля, примерно соответствующего фактору заполнения $\nu = 2$, для всех исследованных значений $V_{bg} > V_{th}$, включая два, представленных на рис. 4. Таким образом, мы заключаем, что формирование состояния квантового эффекта Холла с полным фактором заполнения $\nu = 2$ в исследованных образцах сопровождается переходом электронной системы в однослойное состояние, сохраняющееся в более сильных полях при меньших факторах заполнения, в том числе и в сжимаемых состояниях при $2 > \nu > 1$. Отметим дополнительно совпадение амплитуд минимумов емкостей $C_{bg,n}$ и $C_{tg,n}$ на рис. 4а на факторах заполнения $\nu = 4/3$ и $5/3$, соответствующих состояниям дробного квантового эффекта Холла. Наблюдение двух таких состояний является дополнительным свидетельством однослойного характера ЭС, так как оно является естественным для однослойной системы, в то время как возникновение состояния с $\nu = 5/3$ в случае двухслойной системы потребовало бы специальных предположений для его объяснения. При низких температурах неизбежно влияние резистивных эффектов [14] на величину глубоких минимумов в емкости (в нашем случае такие эффекты заведомо существенны, если провалы в емкости в состояниях квантового эффекта Холла превышают 10 %). Кривые, показанные на рис. 4б, были измерены при $T = 3$ К, когда резистивные эффекты отсутствовали во всем диапазоне магнитных полей. Они демонстрируют очень хорошее совпадение амплитуд минимумов в разных нормированных емкостях на факторах заполнения 1 и 2, доказывающее однослойный характер системы в соответствующих состояниях квантового эффекта Холла, аналогично тому, как это наблюдалось в работе [5].

Обсудим дополнительно наблюдаемое на рис. 3 совпадение емкостей, измеренных при разных значениях плотности электронов, именно на факторе заполнения $\nu = 3/2$ и их расхождение при отходе от этого значения. Этот факт связан с сильной зависимостью сжимаемости двумерных электронных систем в квантующем магнитном поле от фактора заполнения и величины поля. Точки на различных кривых, имеющие одинаковую абсциссу, соответствуют различным значениям магнитного поля. Так, например, в самом сильном поле (на сплошной темной кривой) становятся выраженными минимумы сжимаемости, соответствующие состояниям дробного квантового эффекта Холла на факторах заполнения $\nu = 5/3$ и $4/3$. На факторе же заполнения $\nu = 3/2$

не ожидается возникновения никаких несжимаемых состояний, а уровень Ферми лежит в центре верхнего спинового подуровня, где велика плотность одночастичных состояний и, соответственно, ее вклад в сжимаемость двумерной электронной системы. В работе [15] было установлено, что изменение сжимаемости двумерных электронных систем при увеличении магнитного поля от нуля до значения, соответствующего фактору заполнения $\nu = 1/2$, когда уровень Ферми оказывается в центре нижнего спинового подуровня, близко к изменению сжимаемости системы невзаимодействующих электронов. Этот факт свидетельствует о том, что вклад эффектов взаимодействия в величину сжимаемости двумерной электронной системы примерно одинаков в нулевом поле и на факторе заполнения $\nu = 1/2$. В результате значения емкости C полевого транзистора в этих двух состояниях оказываются связанными следующим соотношением [15]:

$$C^{-1}(\nu = 1/2) = C^{-1}(B = 0) - \pi \hbar^2 / m^* e^2 S. \quad (1)$$

Здесь m^* – эффективная масса двумерных электронов, S – площадь двумерной системы под затвором. В нашем случае этот результат оказывается справедливым и для фактора заполнения $\nu = 3/2$ вследствие большой одночастичной плотности состояний при этом факторе заполнения. Этот факт демонстрируется на рис. 1б сравнением экспериментального и вычисленного значений емкости при $\nu = 3/2$ для однослойного состояния электронной системы при $V_{bg} = 0$.

В случае двухслойной электронной системы классификация электронных состояний помимо их распределения по слоям, являющегося основным предметом наших исследований, может осуществляться по их принадлежности к одной из (двух) подзон размерного квантования. Соответствующие классы состояний совпадают в случае слабой туннельной связи между слоями и значительной разности плотностей электронов в слоях (асимметрии электронной системы). В таком случае электроны двух разных подзон оказываются локализованными в разных слоях. В симметричном состоянии (в состоянии баланса) при наличии туннелирования распределение электронов становится совершенно иным. В этом случае плотности электронов одинаковы в разных слоях и различаются в разных подзонах, соответствующих симметричным и антисимметричным волновым функциям. При этом разность энергий между доньями подзон (межподзонное расщепление) Δ достигает минимального значения Δ_{SAS} , являющегося мерой туннельной связи между слоями и широко извест-

ного как симметрично-антисимметричное расщепление. Величина межподзонного расщепления может быть определена из межподзонных магнетоосцилляций сопротивления, положения максимумов которых определяются условием совпадения уровней Ландау двух разных подзон: $\Delta = n\hbar\omega_c$, где $n = 1, 2, 3 \dots$ (см., например, работу [16] и ссылки в ней). Это условие эквивалентно соизмеримости разности плотностей электронов в двух подзонах Δn_s с вырожденностью уровня Ландау: $\Delta n_s = 2nN_0$. Результаты измерений $\Delta n_s(V_{bg})$ представлены на рис. 5. Мини-

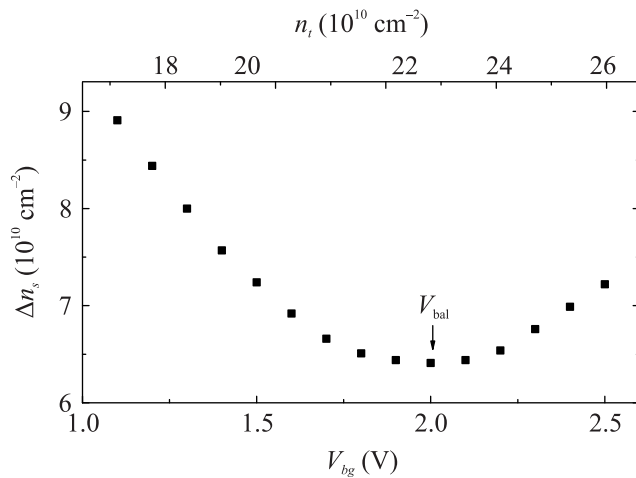


Рис. 5. Зависимость от V_{bg} разности плотностей электронов Δn_s в двух подзонах размерного квантования, определенной из периодичности межподзонных магнетоосцилляций сопротивления. Положение минимума $\Delta n_s(V_{bg})$ при $V_{bg} = V_{bal}$ соответствует электронной конфигурации с равными плотностями электронов в разных слоях. Измерения выполнены при $V_t = 0$ и $T = 4.2$ К. На верхней шкале приведена полная плотность электронов в системе n_t

мум на этой зависимости соответствует точке баланса, достигающейся при $V_{bg} = V_{bal} \approx 2$ В, в которой плотность электронов в верхнем слое, $n_{s,TL}$, равна плотности электронов в нижнем слое, $n_{s,BL}$. Ключевое же наблюдение независимости емкости C_{bg} при $\nu = 3/2$ от затворного напряжения V_{bg} выполняется при всех исследованных значениях V_{bg} : как при $V_{bg} < V_{bal}$, так и при $V_{bg} > V_{bal}$ (см. рис. 1б и 3). Следовательно, локализация электронов в однослойном состоянии именно около верхнего края ямы происходила в нашем эксперименте независимо от соотношения между плотностями электронов в разных слоях двухслойного состояния: как при $n_{s,TL} > n_{s,BL}$, так и при выполнении обратного неравенства.

Отметим, что наблюдаемый нами переход из двухслойного состояния в однослойное соответствует

переходу электронов из минимума потенциала около нижней стенки квантовой ямы в минимум, расположенный около верхней стенки, как это схематически показано на рис. 6б,с. В этом случае представляет

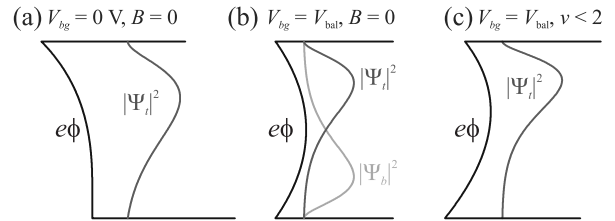


Рис. 6. Схематическое изображение формы потенциальной ямы и распределения поперек ямы плотности электронов в верхнем, $|\Psi_l|^2$, и нижнем, $|\Psi_b|^2$, слоях для различных экспериментальных условий. (а) — Однослойная система при $V_{bg} = 0$, $B = 0$. (б) — Двухслойная электронная система в симметричной конфигурации при $V_{bg} = V_{bal}$, $B = 0$. (в) — Однослойная электронная система при $V_{bg} = V_{bal}$ в сильных магнитных полях при $\nu < 2$

ся удивительным существованием глубокого минимума потенциала около нижней стенки ямы, незаполненного электронами (рис. 6с). Такой факт, однако, может быть качественно объяснен отрицательным вкладом в сжимаемость двумерных электронных систем, обусловленным обменным взаимодействием. Этот вклад был получен теоретически [17] и прямо наблюдался экспериментально [18, 19]. Абсолютное значение этого вклада возрастает при уменьшении плотности электронов и сопровождается возрастанием химического потенциала, способствующим опустошению слоя с меньшей плотностью. Более того, идея о возможности спонтанного заполнения только одной из двух близко расположенных квантовых ям в результате обменного взаимодействия электронов, была высказана в работе [20] для случая нулевого магнитного поля и вызвала довольно широкую дискуссию [21–24]. Факторами, препятствующими реализации этой идеи, являются увеличение кинетической энергии электронов и энергии электрического поля, происходящие при заполнении только одной из двух квантовых ям. В нашем же случае сильного магнитного поля ($\nu < 2$) и узких уровней Ландау переход электронов между ямами не сопровождается изменением их кинетической энергии, равной половине циклотронной. Этот фактор, по-видимому, является решающим для реализации наблюдаемого в нашем эксперименте перехода именно в сильном магнитном поле. Кроме того, в случае узких уровней Ландау сжимаемость электронной системы полностью определяется электрон-электронным взаимо-

действием и является отрицательной (см., например, работы [18, 19]). Что касается изменения энергии электрического поля, в нашем случае асимметричной структуры с легированием только с одной стороны квантовой ямы этот фактор, наоборот, способствует наблюдаемому переходу электронов именно в верхний слой, ближайший к слою доноров. Это можно качественно пояснить следующим образом. Отвлечемся для простоты от наличия верхнего затвора, находящегося при нулевом напряжении. В таком случае, электрическое поле выше потенциальной ямы является фиксированным, определяемым плотностью заряда ионизованных доноров, и не зависит от распределения электронов поперек квантовой ямы. С другой же стороны ямы электрическое поле может изменяться, так как фиксированным является затворное напряжение на нижнем затворе. В этом случае при переходе электронов из нижнего слоя в верхний происходит уменьшение емкости плоского конденсатора, образованного нижним затвором и электронной системой, что при постоянном затворном напряжении соответствует уменьшению энергии электрического поля. Таким образом, наблюдаемый нами эффект перераспределения электронов может быть качественно объяснен высокой степенью вырожденности уровней Ландау, отрицательной сжимаемостью электронов и специальной асимметричной архитектурой используемого полевого транзистора. Полное описание наблюдаемого эффекта требует самосогласованного расчета подзон размерного квантования в широкой квантовой яме с учетом эффектов обмена и корреляции и является отдельной задачей для будущего.

О результатах подобного расчета для состояний квантового эффекта Холла в широкой квантовой яме на факторах заполнения $\nu = 2$ и 4, выполненного в приближении локальной плотности, кратко сообщалось в работе [7]. Расчет был выполнен для объяснения экспериментальных результатов по гистерезису магнетосопротивления. Расчет связал наблюдаемый гистерезис с квантовыми переходами первого рода, состоящими в перераспределении электронов между слоями, сопровождающемся полным опустошением одного из уровней Ландау. В случае симметричной квантовой ямы перераспределение электронов приводит к спонтанному нарушению симметрии с возможностью противоположных знаков параметра асимметрии в разных латеральных областях образца, что соответствует возникновению доменной структуры. В случае фактора заполнения двойка такое перераспределение означало бы полное опустошение одного из слоев аналогично нашему результа-

ту, что, впрочем, в работе [7] отмечено не было. Добавим, что все рассмотрение этой работы относилось исключительно к целочисленным значениям фактора заполнения $\nu = 2$ и 4.

Резюмируя, нами обнаружен переход электронной системы, создаваемой в широкой квантовой яме GaAs из двухслойного состояния в нулевом магнитном поле в однослойное в квантующем поле, происходящий при факторе заполнения разрешенных по спину уровней Ландау, равном двум. Переход соответствует заполнению двумерного слоя, расположенного около стенки ямы, ближайшей к слою селективного легирования, независимо от соотношения плотностей электронов в разных слоях в нулевом поле. Предложено качественное объяснение наблюдаемого эффекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-22-00753, <https://rscf.ru/project/22-22-00753/>.

1. A. G. Davies, C. H. W. Barnes, K. R. Zolleis, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **54**, R17331 (1996).
2. H. Deng, Y. Liu, I. Jo, L. N. Pfeiffer, K. W. West, K. W. Baldwin, and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **96**, 081102(R) (2017).
3. J. Nuebler, B. Friess, V. Umansky, B. Rosenow, M. Heiblum, K. von Klitzing, and J. Smet, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 046804 (2012).
4. С. И. Дорожкин, Письма в ЖЭТФ **103**, 578 (2016).
5. S. I. Dorozhkin, A. A. Kapustin, I. B. Fedorov, V. Umansky, and J. H. Smet, *Phys. Rev. B* **102**, 235307 (2020).
6. S. M. Girvin and A. H. MacDonald, in *Perspectives on Quantum Hall Effects*, ed. by S. Das Sarma and A. Pinczuk, Wiley, N.Y. (1997).
7. V. Piazza, V. Pellegrini, F. Beltram, W. Wegscheider, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Nature (London)* **402**, 638 (1999).
8. V. T. Dolgoplov, A. A. Shashkin, E. V. Deviatov, F. Hastreiter, M. Hartung, A. Wixforth, K. L. Campman, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **59**, 13235 (1999).
9. S. I. Dorozhkin, A. A. Kapustin, I. B. Fedorov, V. Umansky, K. von Klitzing, and J. H. Smet, *J. Appl. Phys.* **123**, 084301 (2018).
10. В. М. Поляновский, ФТП **22**, 2230 (1988).
11. P. T. Coleridge, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 961 (1990).
12. А. А. Капустин, С. И. Дорожкин, И. Б. Федоров, В. Уманский, Ю. Х. Смет, Письма в ЖЭТФ **110**, 407 (2019).
13. S. J. Papadakis, J. P. Lu, M. Shayegan, S. R. Parihar, and S. A. Lyon, *Phys. Rev. B* **55**, 9294 (1997).

14. С. И. Дорожкин, А. А. Шашкин, Н. Б. Житенев, В. Т. Долгополов, Письма в ЖЭТФ **44**, 189 (1986).
15. S. I. Dorozhkin, J. H. Smet, K. von Klitzing, V. Umansky, R. J. Haug, and K. Ploog, Phys. Rev. B **63**, 121301(R) (2001).
16. А. А. Быков, Д. В. Номоконов, А. В. Горан, И. С. Стрыгин, А. К. Бакаров, С. Абеди, С. А. Виткалов, Письма в ЖЭТФ **114**, 486 (2021).
17. S. Nagano, K. S. Singwi, and S. Ohnishi, Phys. Rev. B **29**, 1209 (1984).
18. J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **68**, 674 (1992).
19. J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. B **50**, 1760 (1994).
20. P. P. Ruden and Zh. Wu, Appl. Phys. Lett. **59**, 2165 (1991).
21. L. Zheng, M. W. Ortalano, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **55**, 4506 (1997).
22. F. A. Reboredo and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **58**, 7450 (1998).
23. S. Das Sarma, M. W. Ortalano, and L. Zheng, Phys. Rev. B **58**, 7453 (1998).
24. A. V. Dmitriev, Semicond. Sci. Technol. **14**, 852 (1999).

Эффекты памяти в неравновесном критическом поведении двумерной XU -модели в низкотемпературной фазе Березинского

А. П. Попова¹⁾, И. С. Попов, С. П. Чемерис, В. В. Прудников, П. В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2023 г.

После переработки 6 мая 2023 г.

Принята к публикации 15 мая 2023 г.

Осуществлено Монте-Карло исследование неравновесных эффектов памяти в двумерной чистой и структурно неупорядоченной XU -модели в низкотемпературной фазе Березинского. Показаны особенности взаимосвязи эффектов памяти и старения. Выявлено качественно новое для эффектов памяти явление: притяжение динамических кривых автокорреляционной функции во временном диапазоне термодиклирования к динамическим зависимостям с исходной температурой. Показана уникальная реализация эффектов памяти как при термодиклированном замораживании, так и нагревании системы при условии, что температуры замораживания и нагревания находятся в низкотемпературной фазе Березинского. Осуществлен анализ влияния структурного беспорядка на эффекты памяти и выявлено их усиление в структурно неупорядоченной системе за счет усиления эффектов старения.

DOI: 10.31857/S123456782312011X, EDN: exfasy

Современное состояние статистической физики в области фазовых переходов определяется прежде всего изучением неравновесного критического поведения макроскопических объемных и низкоразмерных систем [1–6], что обусловлено их аномально медленной динамикой, характеризующейся возникновением эффектов старения и памяти, а также нарушением флуктуационно-диссипативной теоремы [2, 4]. Неравновесные эффекты старения проявляются в замедлении релаксационных и корреляционных процессов в системе с ростом возраста образца [1]. Эффекты старения в критической релаксации неупорядоченных статистических систем исследовались в работах [6–8]. Эффекты памяти в системах с медленной динамикой проявляются в возвращении временных зависимостей характеристик неравновесной релаксации к изначальным зависимостям и состояниям после кратковременного воздействия на систему [4]. При исследовании эффектов памяти в критических явлениях выбирается температурное воздействие в виде термодиклированного изменения состояния системы [9–11].

Понижение размерности системы и переход к системам с непрерывным вырождением сопровождается существенным усилением флуктуационных эффектов [12]. Особое место среди двумерных классических спиновых моделей статистической механики занимает двумерная XU -модель [12, 13].

В данной модели возникает топологический фазовый переход Березинского–Костерлица–Таулесса (БКТ) [14–18] при температуре $T_{\text{БКТ}}$. Низкотемпературная фаза Березинского при $T < T_{\text{БКТ}}$ характеризуется возникновением квазидальнего порядка и непрерывным множеством неподвижных точек ренормгруппового преобразования [13, 15], поэтому каждая температура в низкотемпературной фазе, вплоть до точки фазового перехода $T_{\text{БКТ}}$, является “подобием” критической точки. Природа неравновесных релаксационных процессов в двумерной XU -модели существенно зависит от ее начального состояния [19–21]: при эволюции из высокотемпературного начального состояния релаксация преимущественно вихревая, а из низкотемпературного начального состояния – спин-волновая.

Из-за непрерывного множества псевдокритических точек в низкотемпературной фазе исследование неравновесных процессов в двумерной XU -модели [4] вызывает особый интерес в связи с возможностью проявления эффектов медленной динамики в широком температурном диапазоне $T \leq T_{\text{БКТ}}$, а не только вблизи критической точки T_c , как в случае применения других классических моделей статистической физики [6, 7, 9–11]. Предсказываемое и наблюдаемое явление низкотемпературного огрубления в системах с дальним порядком при $T < T_c$ [22] характеризуется заметно более быстрым спаданием двухвременных характеристик – автокорреляционной функции и функции отклика, от време-

¹⁾e-mail: popova.theorphys@gmail.com

ни наблюдения и гораздо более слабыми эффектами старения, чем в данных системах при $T = T_c$, а тем более для двумерной ХУ-модели с очень медленной динамикой и долговременными эффектами старения при $T \leq T_{\text{ВКТ}}$. Эти свойства приводят к практически ненаблюдаемым эффектам долговременной памяти в системах с дальним порядком при температурах замораживания вне критической области. Данная особенность низкотемпературной фазы Березинского позволила осуществить исследование в двумерной ХУ-модели неравновесных эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы с учетом влияния температурного фактора [19–21]. Рассмотрение влияния структурного беспорядка приводит в двумерной ХУ-модели к возникновению эффекта пиннинга вихрей на дефектах структуры. В моделях с подвижными дефектами пиннинг вихрей может приводить и к обратному воздействию на структурный беспорядок, а именно, к неравновесному вихревому отжигу структурного беспорядка [23].

Возникновение эффектов памяти при термоциклировании в неравновесном критическом поведении ряда классических моделей статистической физики изучалось в работах [9–11]. Однако в случае существования в системе одной критической точки T_c , данные исследования были ограничены воздействием температурного замораживания, которое временно понижает температуру системы относительно критической температуры T_c , так как при нагревании таких систем эффектов памяти в них не возникает. В настоящей работе осуществлено исследование эффектов памяти в неравновесном поведении двумерной чистой и структурно неупорядоченной ХУ-модели при их релаксации из начального высокотемпературного состояния как при замораживании, так и нагревании относительно температуры T в низкотемпературной фазе, что является специфической особенностью данной модели. Выбор начального состояния связан с реализацией канонического старения в неравновесной динамике двумерной ХУ-модели при эволюции из высокотемпературного начального состояния [19, 21]. Релаксация системы из начального низкотемпературного состояния сопровождается реализацией явлений сверхстарения и субстарения [20], поэтому выбор такого начального состояния существенно искажает общую картину неравновесных эффектов памяти и в данной работе не рассматривается.

Эффекты памяти в медленной динамике системы проявляются в первую очередь как возвращение характеристик релаксации к исходным значениям после кратковременного внешнего воздействия, в ка-

честве которого в данной работе использовано термоциклирование как с охлаждением, так и нагреванием. Основной особенностью проявления эффектов памяти в двумерной ХУ-модели является переход процессов неравновесной релаксации системы из одной критической точки в другую. Из-за этого ожидается, что во временном диапазоне термоциклирования система, удаляясь от исходной неподвижной точки, будет притягиваться к другой неподвижной точке, соответствующей температуре термоциклирования, если она находится в низкотемпературной фазе Березинского. Подобное проявление неравновесных эффектов свойственно только двумерной ХУ-модели благодаря существованию низкотемпературной фазы Березинского.

Ожидается, что неравновесные эффекты старения и памяти будут демонстрировать взаимосвязь, что может проявиться в замедлении процесса восстановления критической релаксации системы после воздействия на систему. Поэтому исследование эффектов памяти в данной работе основано на анализе двухвременных зависимостей спин-спиновой автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ [20]:

$$C(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^2} \sum_i p_i \mathbf{S}_i(t) \mathbf{S}_i(t_w) \right\rangle \right], \quad (1)$$

где угловые $\langle \dots \rangle$ и квадратные $[\dots]$ скобки соответствуют процедурам статистического усреднения и усреднения по различным конфигурациям распределения дефектов для структурно неупорядоченной системы.

Основное проявление эффектов медленной динамики в двухвременной зависимости $C(t, t_w)$ происходит в режиме старения на характерных временах $t - t_w \sim t_w$ [19–21]. Поэтому время t_1 начала термоциклирования выбрано равным времени ожидания $t_1 - t_w = t_w$, а продолжительность термоциклирования $t_2 - t_1$ была выбрана $t_2 - t_1 = t_w, 2t_w$ и $3t_w$. Термоциклирование осуществлялось как путем понижения температуры T системы при замораживании на величину $\Delta T = 0.5 T$, так и нагреванием на величину $\Delta T = T$, т.е. при изменении температуры системы во временном интервале термоциклирования в два раза. Необходимо отметить, что проявление эффектов памяти ожидается только, когда температуры замораживания T и термоциклирования $T + \Delta T$ находятся в низкотемпературной фазе Березинского с $T, T + \Delta T \leq T_{\text{ВКТ}}$.

Гамильтониан $H[\mathbf{S}]$ структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели в настоящей работе выбран в следующем виде

$$H[\mathbf{S}] = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (2)$$

где $\mathbf{S}_i$ – планарный классический спин единичной длины, связанный с i -м узлом двумерной квадратной решетки с линейным размером L ; p_i – число заполнения i -го узла: если $p_i = 1$, то в узле расположен спин, а если $p_i = 0$ – дефект структуры. Дефекты распределялись по решетке равномерно с вероятностью $1 - p$, где p – спиновая концентрация. Суммирование $\langle i, j \rangle$ проводится по всем парам ближайших соседей. Температура T измеряется в единицах обменного интеграла $J > 0$.

Моделирование неравновесного критического поведения двумерной ХУ-модели из начального высокотемпературного состояния в данной работе осуществляется с использованием алгоритма Метрополиса. Динамика, реализуемая алгоритмом Метрополиса, соответствует релаксационной критической динамике с несохраняющимся параметром порядка [19]. В качестве единицы времени используется шаг Монте-Карло на спин (MCS/s), под которым понимается $N = pL^2$ переворотов спинов в единицу времени. В настоящей работе выбраны значения спиновой концентрации $p = 1.0$ (чистая система), 0.9 и 0.8 (структурно неупорядоченная система). Для данных значений p спиновой концентрации существуют достаточно точно вычисленные значения температуры $T_{\text{ВКТ}}(p)$ фазового перехода БКТ, с использованием которых в работах [21] выполнены детальные исследования эффектов старения в двумерной ХУ-модели.

Системе задавался старт из начального высокотемпературного состояния со значением намагниченности $m_0 \ll 1$, которое приготавливалось при температуре $T_0 \gg T_{\text{ВКТ}}(p)$. Температуры системы выбирались в диапазоне $T \leq T_{\text{ВКТ}}(p)$ с $T/T_{\text{ВКТ}}(p) = 1.0, 0.5, 0.25$ и 0.125 . Времена ожидания t_w брались равными $100, 400, 1000$ и 2000 MCS/s. Время наблюдения $t - t_w$ было выбрано 10000 MCS/s, что позволило исследовать двухвременные зависимости $C(t, t_w)$ критической релаксации двумерной ХУ-модели для основных динамических режимов $t - t_w \ll t_w$ и $t - t_w \gg t_w$, между которыми наблюдается область динамического кроссовера $t - t_w \sim t_w$. Линейный размер системы $L = 256$ был выбран из соображений, что корреляционная длина $\xi(t) \ll L$ на рассматриваемых временах t , что позволяет выявить асимптотические свойства критической релаксации системы [21]. Статистическое усреднение динамических зависимостей для чистой системы проводилось по 3000 статистическим конфигурациям. При моделировании структур-

но неупорядоченной системы усреднение проводилось по 1000 конфигурациям распределения структурного беспорядка в системе и по 10 статистическим конфигурациям для каждой примесной конфигурации с концентрацией спинов p .

Рассчитанные с учетом процессов термоциклирования двухвременные динамические зависимости $C(t, t_w)$ критической релаксации двумерной ХУ-модели с различными спиновыми концентрациями p представлены на рис. 1. Они демонстрируют как особенности влияния понижения температуры системы $T = T_{\text{ВКТ}}(p)$ до температуры $T_{\text{ВКТ}}(p)/2$ (рис. 1 а1–а3), так и ее повышения от $T = T_{\text{ВКТ}}(p)/2$ до температуры $T_{\text{ВКТ}}(p)$ (рис. 1 б1–б2). Так, реакция системы на замораживание характеризуется начальным увеличением значений $C(t, t_w)$ по сравнению со значением при $T_{\text{ВКТ}}(p)$ и последовательным приближением к значениям $C(t, t_w)$ для температуры $T_{\text{ВКТ}}(p)/2$ с увеличением временного интервала замораживания $t_2 - t_1$ в единицах t_w . С момента времени t_2 возвращения температуры системы к $T_{\text{ВКТ}}(p)$ идет процесс спада значений автокорреляционной функции и $C(t, t_w)$ стремится вернуться к кривой при $T_{\text{ВКТ}}(p)$. Реакция системы на нагревание характеризуется обратным эффектом, а именно, уменьшением значений $C(t, t_w)$ по сравнению со значением при $T_{\text{ВКТ}}(p)/2$ и приближением к кривой $C(t, t_w)$ при температуре $T_{\text{ВКТ}}(p)$. С момента времени t_2 возвращения температуры системы к $T_{\text{ВКТ}}(p)/2$ идет процесс увеличения значений автокорреляционной функции и приближения к кривой $C(t, t_w)$ при $T_{\text{ВКТ}}(p)/2$.

Для выявления эффектов памяти и сопоставления зависимостей $C(t, t_w)$ у системы с термоциклированием и без термоциклирования необходимо в $C(t, t_w)$ (рис. 1а, б) “вырезать” временные диапазоны, на которых осуществлялось изменение температуры [9–11]. Такие двухвременные зависимости $C(t, t_w)$ с “вырезанными” временными диапазонами термоциклирования представлены на рис. 1 с1–с3 для случая замораживания системы от температуры $T = T_{\text{ВКТ}}(p)$ до $T = T_{\text{ВКТ}}(p)/2$. Представленные результаты демонстрируют особенности проявления эффектов памяти: если для зависимостей $C(t, t_w)$ из времени наблюдения $t - t_w$ вычесть интервал времени $t_2 - t_1$ термоциклирования, то автокорреляционная функция стремится вернуться к значению, которое она имела в момент времени замораживания t_1 , и происходит плавное возвращение зависимостей $C(t, t_w)$ для термоциклированной системы на исходные кривые при температуре T для системы без термоциклирования, сопровождаемые переходным релаксационным процессом. Из анализа кривых

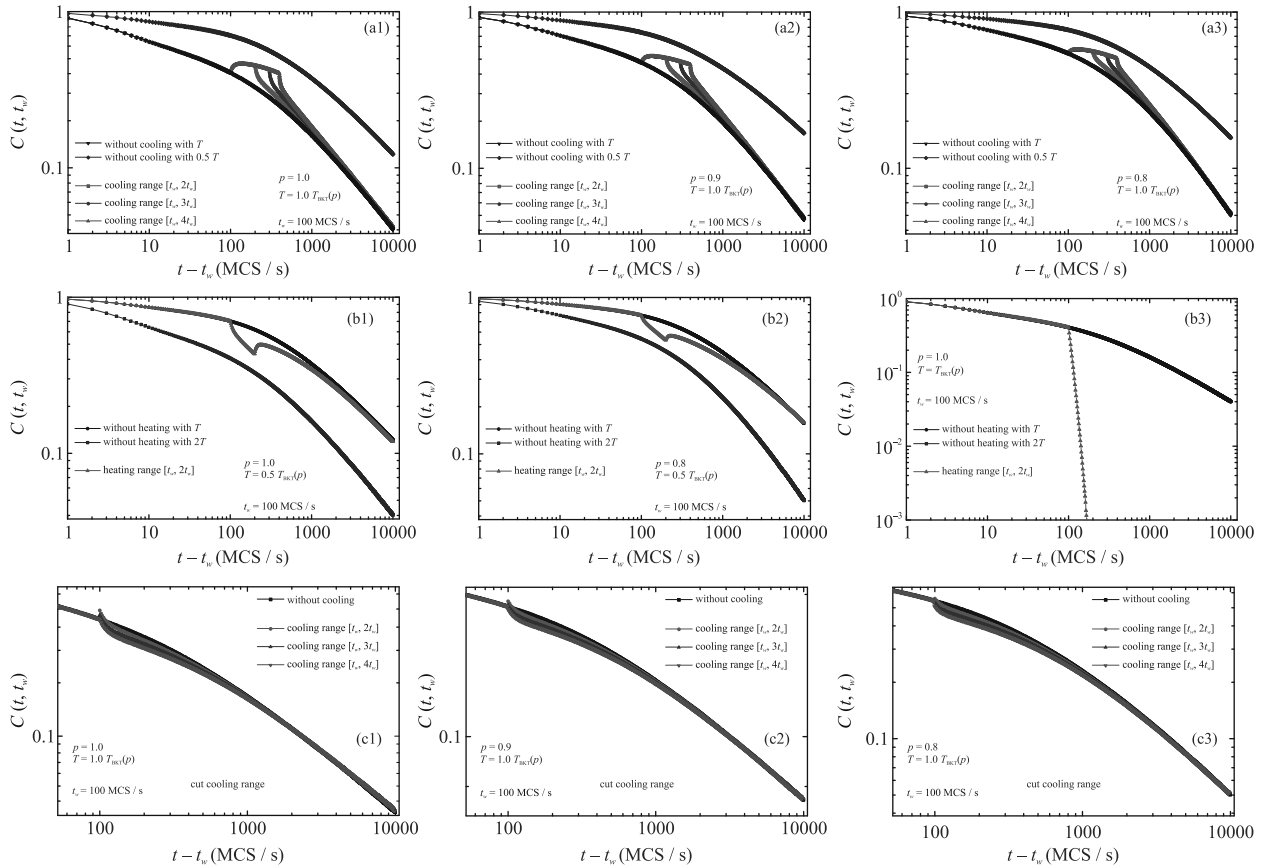


Рис. 1. (Цветной онлайн) Двухвременные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ термоциклированной критической релаксации двумерной XY -модели для спиновых концентраций $p = 1.0$ (чистая система), 0.9 и 0.8 (структурно неупорядоченная система) для времени ожидания $t_w = 100$ MCS/s: (a1)–(a3) – при процессах замораживания от температуры $T = T_{\text{BKT}}(p)$ до $T_{\text{BKT}}(p)/2$; (b1)–(b2) – при процессах нагревания от температуры $T = T_{\text{BKT}}(p)/2$ до $T_{\text{BKT}}(p)$; (b3) – при процессе нагревания от температуры $T = T_{\text{BKT}}(p = 1.0)$ до $2T_{\text{BKT}}(p = 1.0)$; (c1)–(c3) – зависимости $C(t, t_w)$ с “вырезанными” временными диапазонами термоциклирования. Для сравнения приведены кривые $C(t, t_w)$ для систем без термоциклирования при температурах T и $0.5 T$. Сопоставление результатов (b1)–(b2) и (b3) демонстрирует исчезновение эффектов памяти при выходе температуры термоциклирования из низкотемпературной фазы $T + \Delta T > T_{\text{BKT}}(p)$

на рис. 1 c1–c3 видно, что для чистой модели с $p = 1.0$ возвращение $C(t, t_w)$ к значению в момент замораживания при t_1 осуществляется для всех рассмотренных интервалов замораживания, в то время как с ростом концентрации дефектов память о состоянии в момент замораживания t_1 восстанавливается только после более коротких временных интервалов замораживания $[t_w, 3t_w]$ для модели с $p = 0.9$ и $[t_w, 2t_w]$ для модели с $p = 0.8$. Для более длинных временных интервалов замораживания структурно неупорядоченной системе необходимы значительно большие времена наблюдения $t - t_w$, чтобы проявилось возвращение $C(t, t_w)$ к значению в момент замораживания t_1 . Таким образом, можно утверждать об усилении эффектов памяти в неравновесном критическом поведении двумерной XY -модели с ростом концентрации

дефектов: при этом такая система не только дольше “помнит” состояние в момент t_1 замораживания, но и дольше его “вспоминает”.

Необходимо отметить, что если при нагревании состояние двумерной XY -модели попадает в высокотемпературную фазу с $T > T_{\text{BKT}}(p)$, то в этой области температур автокорреляционная функция характеризуется экспоненциальным временным спаданием $C(t, t_w) \sim \exp[-(t - t_w)/t_{\text{cor}}]$, где t_{cor} – время корреляции, и при термоциклировании у $C(t, t_w)$ не возникает эффектов памяти – возвращения к состоянию в момент нагревания t_1 и к зависимости $C(t, t_w)$ при исходной температуре $T \leq T_{\text{BKT}}(p)$. Это показано на рис. 1 b3 для рассчитанной зависимости $C(t, t_w)$ в чистой модели при ее нагревании от исходной температуры $T = T_{\text{BKT}}$ до температуры $2T_{\text{BKT}}$.

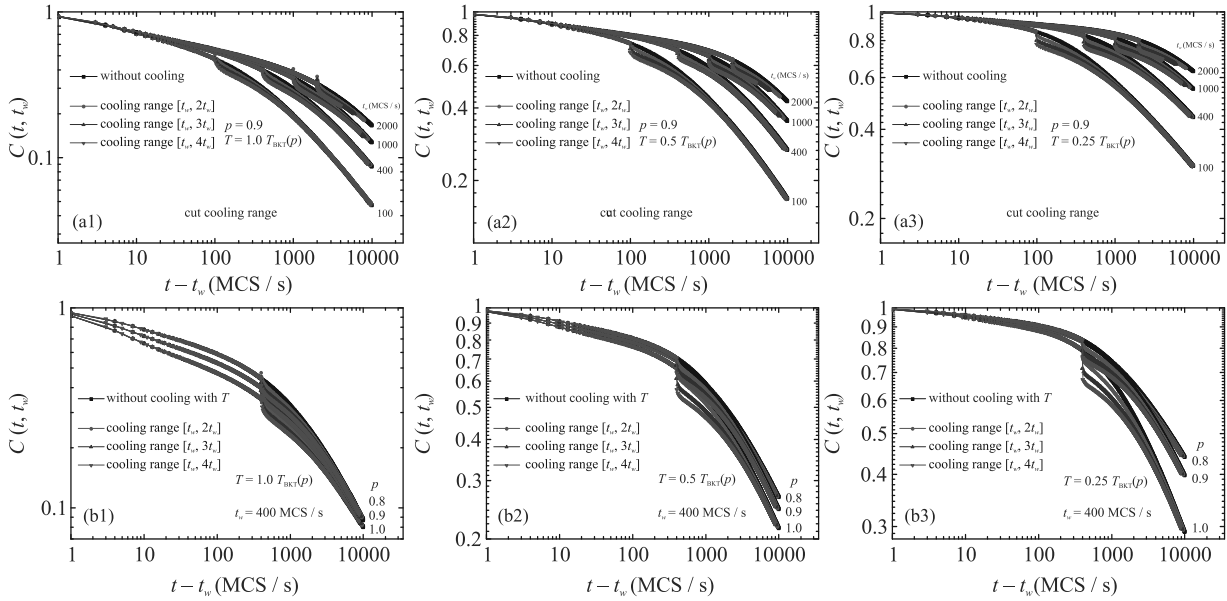


Рис. 2. (Цветной онлайн) Двухвременные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ термоциклированной критической релаксации двумерной ХУ-модели с “вырезанными” временными диапазонами замораживания системы: (a1)–(a3) сравнение кривых для различных времен ожидания t_w при спиновой концентрации $p = 0.9$ и исходных температурах системы $T = 1.0, 0.5, 0.25 T_{\text{BKT}}(p)$; (b1)–(b3) – сравнение кривых для различных значений спиновой концентрации p при исходных температурах $T = 1.0, 0.5, 0.25 T_{\text{BKT}}(p)$ и времени ожидания $t_w = 400$ MCS/s. Для сравнения приведены кривые $C(t, t_w)$ для систем без термоциклирования

Для анализа влияния времени ожидания t_w и продолжительности интервала замораживания на проявление эффектов памяти кривые двухвременных зависимостей $C(t, t_w)$ при различных значениях t_w были построены совместно на рис. 2 a1–a3. Из представленных результатов видно, что с ростом t_w происходит замедление переходного релаксационного процесса. При этом, на выбранных в данной работе временах наблюдения $t - t_w = 10000$ MCS/s, полноценное совпадение кривых $C(t, t_w)$ наблюдается только для малых времен ожидания $t_w = 100$ и 400 MCS/s. При больших значениях t_w сближение кривых $C(t, t_w)$ с термоциклированием и без термоциклирования хотя и наблюдается, но для полного их совпадения выбранного времени наблюдения $t - t_w = 10000$ MCS/s оказывается недостаточно. Отметим, что данное замедление свойственно именно процессу сближения динамических кривых $C(t, t_w)$. Продолжительность переходного процесса, в рамках которого наблюдается резкий спад $C(t, t_w)$, увеличивается незначительно с ростом t_w . При этом в представленном на рис. 2 a1–a3 логарифмическом масштабе по времени наблюдения $t - t_w$ данный переходный процесс становится более резким, а именно, увеличивается величина $\Delta C(t, t_w)$, на которую резко уменьшается автокорреляционная функция $C(t, t_w)$. Увеличение длительности интервала термоциклирования

(в единицах t_w) также сопровождается замедлением переходного релаксационного процесса и, следовательно, замедлением процесса сближения кривых $C(t, t_w)$ с термоциклированием и без термоциклирования. Данное явление связано с влиянием эффектов старения [19, 21] на эффекты памяти, а именно, что с ростом времени ожидания t_w система дольше “вспоминает” свое исходное состояние.

С целью исследования влияния температуры системы T на проявление эффектов памяти было осуществлено сравнение рассчитанных двухвременных зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ (рис. 2 a1–a3) при процессах замораживания относительно различных исходных значений температуры T . На представленных рисунках видно, что с понижением температуры T происходит замедление переходных процессов. В результате, сближение кривых $C(t, t_w)$ для процессов с термоциклированием и без термоциклирования осуществляется на значительно больших временах наблюдения $t - t_w$. Однако продолжительность переходного процесса, характеризующего резким спадом $C(t, t_w)$, с понижением температуры T существенно уменьшается. Данный переходный процесс становится более резким с понижением T за счет увеличения значения $\Delta C(t, t_w)$, характеризующего резкий спад величины $C(t, t_w)$. Данные особенности связаны с замедлением релаксационных про-

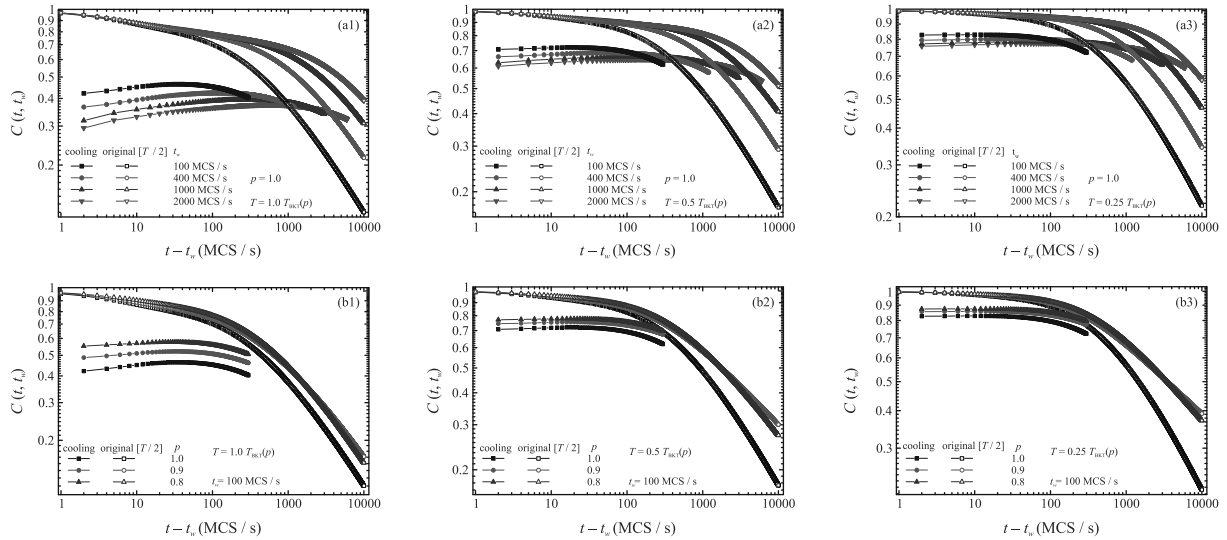


Рис. 3. (Цветной онлайн) Двухвременные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ во временном интервале замораживания длительностью $3t_w$, сопоставленные с кривыми $C(t, t_w)$ при температуре замораживания $T/2$: (a1)–(a3) – сравнение кривых при различных временах ожидания t_w для чистой системы с исходными температурами $T = 1.0, 0.5, 0.25 T_{\text{BKT}}(p)$; (b1)–(b3) – сравнение кривых для систем с различными спиновыми концентрациями p и исходными температурами $T = 1.0, 0.5, 0.25 T_{\text{BKT}}(p)$, время ожидания $t_w = 100 \text{ MCS/s}$

цессов в двумерной ХУ-модели с понижением температуры T в низкотемпературной фазе Березинского $T < T_{\text{BKT}}(p)$, что отмечалось ранее в работах [19, 21].

Для выделения роли структурного беспорядка в проявлении эффектов памяти в критической динамике двумерной ХУ-модели на рис. 2 b1–b3 представлено сравнение двухвременных зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для систем с различными значениями спиновой концентрации p . Видно, что с увеличением концентрации дефектов (понижением p) и понижением температуры T в низкотемпературной фазе Березинского с $T \leq T_{\text{BKT}}(p)$ происходит сильное замедление корреляционных процессов, которое способствует усилению эффектов памяти, когда память о состоянии в момент замораживания t_1 восстанавливается полностью после более длительных временных интервалов замораживания для структурно неупорядоченных моделей по сравнению с чистой. Кроме того, с ростом концентрации дефектов происходит замедление переходных релаксационных процессов, возникающих в системе на временах больших времени окончания термоциклирования. Это приводит к замедлению процесса сближения динамических кривых $C(t, t_w)$ для систем с термоциклированием и без термоциклирования.

Выделим в двухвременной зависимости $C(t, t_w)$ только участки, соответствующие максимальному из рассмотренных ранее интервалу замораживания $3t_w$.

Проведем сопоставление получаемых кривых в интервале замораживания с рассчитанной зависимостью $C(t, t_w)$ при температуре замораживания $0.5 T$ без термоциклирования системы для времен наблюдения, начинающихся с момента замораживания t_1 . Итоговые динамические зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ представлены на рис. 3а, б. Видно (рис. 3 a1–a3), что с увеличением длительности интервала замораживания, достигаемой увеличением рассматриваемых времен ожидания от $t_w = 100 \text{ MCS/s}$ до $t_w = 2000 \text{ MCS/s}$, кривые, соответствующие динамическим зависимостям $C(t, t_w)$ в интервале замораживания, асимптотически приближаются к невозмущенным зависимостям $C(t, t_w)$ при температуре замораживания $0.5 T$. Следует отметить важную особенность, а именно, что с понижением температуры системы T происходит более быстрое сближение кривых $C(t, t_w)$ в интервале замораживания с невозмущенными термоциклированием зависимостями $C(t, t_w)$ при температуре $0.5 T$. Это связано с уменьшением величины температурного возмущения ΔT при уменьшении температуры системы T . С дальнейшим увеличением длительности интервала замораживания, а фактически времени t_w , можно ожидать наложения данных кривых и реализации критической динамики, описываемой невозмущенными зависимостями $C(t, t_w)$. Этот эффект является особенностью свойств именно низкотемпературной фазы Березинского по сравнению с другими стати-

стическими системами [9–11], когда изменение температуры не выводит систему из критической точки, а переводит систему из одного критического состояния в другое. Представленные на рис. 3 b1–b3 результаты для различных значений спиновой концентрации p демонстрируют важную особенность: с ростом концентрации дефектов структуры за счет сильного замедления корреляционных характеристик в системе, проявляющихся в замедления спада $C(t, t_w)$ с ростом t_w при температуре замораживания $0.5T$, происходит увеличение времени сближения кривых $C(t, t_w)$ с ростом t_w . Это связано с усилением эффектов старения в структурно неупорядоченных системах по сравнению с чистыми системами, что отмечалось в работах [19, 21].

В результате проведенного численного исследования двухвременной автокорреляционной функции впервые были выявлены неравновесные эффекты памяти в двумерной XY-модели в низкотемпературной фазе Березинского $T \leq T_{\text{BKT}}(p)$ относительно процессов термоциклирования. Они имеют принципиальные отличия от аналогичных явлений в других статистических системах, связанных с непрерывным множеством неподвижных точек в низкотемпературной фазе. Температурное воздействие не выводит систему из критического состояния, а переводит систему в другое критическое состояние низкотемпературной фазы и обеспечивает устойчивость эффектов памяти, так как система дольше “помнит” об изначальном неравновесном состоянии до термоциклирования. В работе выявлены особенности взаимосвязи эффектов памяти и старения. Дефекты структуры играют определяющую роль в усилении эффектов памяти и старения. Полученные результаты существенно расширяют представления об эффектах медленной динамики в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 20-32-90207 и при поддержке Минобрнауки РФ, соглашение 0741-2020-0002.

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием “Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН”, финансируемого Минобрнауки России по соглашению 075-15-2021-663 [24].

1. U. C. Tauber, *Critical Dynamics: A Field Theory Approach to Equilibrium and Non-Equilibrium Scaling Behavior*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).
2. M. Henkel and M. Pleimling, *Non-Equilibrium Phase Transitions. Ageing and Dynamical Scaling Far from Equilibrium*, Springer, Heidelberg (2010), v. 2.
3. L. Berthier and J. Kurchan, *Nature Phys.* **9**, 310314 (2013).
4. В. В. Прудников, П. В. Прудников, М. В. Мамонова, УФН **187**(8), 817 (2017).
5. W. Liu and U. C. Tauber, *EPL* **128**, 30006 (2019).
6. В. В. Прудников, П. В. Прудников, П. Н. Маляренко, Л. Н. Щур, ЖЭТФ **157**(2), 308 (2020).
7. В. В. Прудников, П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, П. Н. Маляренко, Письма в ЖЭТФ **107**(9), 595 (2018).
8. L. F. Cugliandolo, G. S. Lozano, and N. Nesi, *J. Stat. Mech.* **2017**, 083301 (2017).
9. В. В. Прудников, П. В. Прудников, П. Н. Маляренко, ЖЭТФ **152**, 1293 (2017).
10. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, and E. A. Pospelov, *J. Stat. Mech.* **2016**, 043303 (2016).
11. В. В. Прудников, П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, П. Н. Маляренко, Письма в ЖЭТФ **102**(3), 192 (2015).
12. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**(9), 921 (2017).
13. С. Е. Коршунов, УФН **176**(3), 233 (2006).
14. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970).
15. В. Л. Березинский, *Низкотемпературные свойства двумерных систем с непрерывной группой симметрии*, Физматлит, М. (2007).
16. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
17. J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7**, 1046 (1974).
18. J. M. Kosterlitz, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 040501 (2017).
19. П. В. Прудников, В. В. Прудников, И. С. Попов, Письма в ЖЭТФ **101**(8), 596 (2015).
20. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. С. Попов, ЖЭТФ **153**(3), 442 (2018).
21. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. С. Попов, ЖЭТФ **158**(5), 884 (2020).
22. C. Godrèche and J. M. Luck, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 1589 (2002).
23. I. S. Popov, A. P. Popova, and P. V. Prudnikov, *EPL* **128**(2), 26002 (2020).
24. A. A. Sorokin, S. V. Makogonov, and S. P. Korolev, *Sci. Tech. Inf. Process.* **44**, 302 (2017).

Сила трения Казимира–Лифшица и кинетика радиационного теплообмена металлических пластин при относительном движении¹⁾

Г. В. Дедков²⁾

Кабардино-Балкарский государственный университет, 360004 Нальчик, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2023 г.

После переработки 2 мая 2023 г.

Принята к публикации 15 мая 2023 г.

В рамках флуктуационной электродинамики с учетом температурного изменения материальных свойств проводятся расчеты силы трения Казимира–Лифшица и скоростей нагрева двух металлических пластин с узкой вакуумной щелью при нерелятивистском движении одной из них. Показано, что одинаковые пластины с равной начальной температурой имеют одинаковую скорость нагрева, определяемую мощностью силы трения, и обосновывается возможность измерения силы трения по кинетике нагрева пластин немагнитных металлов с температурой $1 \div 10$ К.

DOI: 10.31857/S1234567823120121, EDN: exfetb

Система двух толстых металлических (диэлектрических) пластин, разделенных вакуумным промежутком с шириной a , является одной из простейших и наиболее распространенных при изучении статического [1, 2] и динамического [3–5] эффектов Казимира, привлекающих очень большое внимание исследователей в последние два десятилетия. Это отражено в недавних обзорах [6–8]. По сути, данная система является компактной “лабораторией” для теоретического и экспериментального исследования квантовых и тепловых флуктуаций электромагнитного поля. Одним из направлений “физики Казимира” (по терминологии [6]) является изучение диссипативных тангенциальных сил, возникающих между пластинами при их относительном движении. При ширине щели $a \geq 10$ нм и температурах $T < \theta_D$ (θ_D – температура Дебая), когда нельзя пренебречь эффектом запаздывания и зависимостью материальных свойств тел от температуры, для диссипативных латеральных сил, обусловленных флуктуациями электромагнитного поля, уместно использовать общее название “силы трения Казимира–Лифшица”, хотя применяются также термины “трение Ван-дер-Ваальса” [9], “трение Казимира” [10], “квантовое трение” [11]. Несмотря на многолетние исследования, убедительные экспериментальные измерения этих сил до сих пор отсутствуют. По нашему мнению, это связано не только с малостью сил трения Казимира–Лифшица по сравнению с

“обычными” флуктуационно-электромагнитными силами (силами притяжения), но также с недостатками “маятниковой” схемы измерений с применением атомно-силового микроскопа [12], в которой эффективная площадь взаимодействия и величина относительной скорости существенно ограничены. Кроме того, до сих пор недостаточное внимание уделялось роли теплового фактора. Более экзотические экспериментальные сценарии рассматривались в [9, 13–17]. В [15–17], в частности, предлагается использовать накопление геометрической фазы вакансионным центром азота (NV) в алмазе при вращении со скоростью $10^3 \div 10^4$ об/с вблизи поверхности диэлектрика с покрытием n -Si или Au. Как известно, NV центры предлагаются в качестве базовых элементов процессоров квантовых компьютеров [18].

В наших недавних работах [19, 20] обсуждались условия значительного возрастания силы трения Казимира–Лифшица, обусловленного изменением диэлектрических свойств металлических тел при температурах $T < \theta_D$ и аномального нагрева металлической частицы при движении вблизи поверхности металлической пластины [21]. Помимо детального исследования этих особенностей в конфигурации двух пластин, основной целью данной работы является теоретическое обоснование возможности определения силы трения из тепловых измерений. В отличие от [19, 20], впервые исследуется общее интегральное выражение для силы трения без линейного разложения по скорости, полученное в рамках флуктуационной электродинамики [22, 23], и связь кинетики нагрева с силой трения. Обращается внимание на тот важный факт, что при нереля-

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

²⁾e-mail: gv_dedkov@mail.ru

тивистском относительном движении пластин с постоянной скоростью V , поддерживаемой внешним агентом, в силу симметрии, одинаковые пластины, имеющие одинаковые локальные начальные температуры, будут нагреваться с одинаковой скоростью, определяемой мощностью силы трения, не зависящей от выбора системы отсчета, совмещенной с одной из пластин. В то же время пластины с разной начальной температурой достаточно быстро приходят к квазитепловому равновесию, продолжая нагреваться. Это позволяет находить силу трения по кинетике нагрева пластин. Возможная схема эксперимента кратко обсуждается в заключительной части статьи.

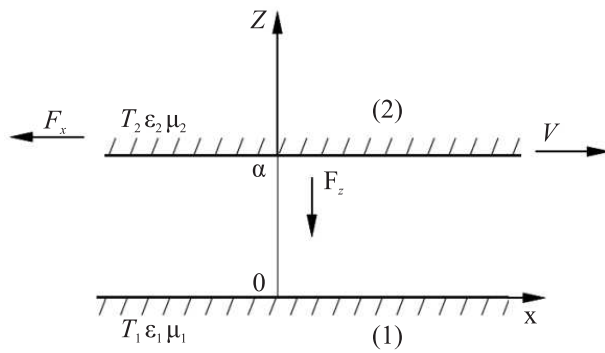


Рис. 1. Конфигурация параллельных пластин

Используем стандартную постановку задачи, в которой пластины предполагаются изготовленными из однородных и изотропных металлов с магнитными проницаемостями μ_1, μ_2 и диэлектрическими проницаемостями $\varepsilon_1, \varepsilon_2$, зависящими от частоты ω и локальных температур T_1 и T_2 (рис. 1). Следуя [19, 20, 22], выразим мощность, развиваемую силой трения F_x , действующей на пластину 2, движущуюся со скоростью V относительно пластины 1, связанной с лабораторной системой отсчета, через радиационные потоки тепла пластин (векторы Пойнтинга флуктуационного электромагнитного поля) P_1 и P_2 , вычисленные в их собственных системах покоя (индексы 1 и 2 здесь и далее соответствуют нумерации пластин на рис. 1, и все величины отнесены к единице площади пластин)

$$F_x V = P_1 + P_2/\gamma, \quad (1)$$

где $\gamma = (1 - V^2/c^2)^{-1/2}$, c – скорость света. Общие релятивистские выражения для P_1 и P_2 были впервые получены Полевым [22]. В нерелятивистском пределе $V/c \ll 1$ с учетом эффекта запаздывания они приводятся к более компактному виду [23]

$$P_1 = \frac{\hbar}{4\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int d^2k \frac{|q|^2}{|Q_m|^2} \text{Im} \left(\frac{q_1}{\mu_1} \right) \text{Im} \left(\frac{\tilde{q}_2}{\mu_2} \right) \times \left[\text{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T_1} \right) - \text{cth} \left(\frac{\hbar\omega^-}{2T_2} \right) \right] + (\mu_{1,2} \leftrightarrow \varepsilon_{1,2}), \quad (2)$$

$$P_2 = -\frac{\hbar}{4\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int d^2k \omega^- \frac{|q|^2}{|Q_m|^2} \text{Im} \left(\frac{q_1}{\mu_1} \right) \text{Im} \left(\frac{\tilde{q}_2}{\mu_2} \right) \times \left[\text{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T_1} \right) - \text{cth} \left(\frac{\hbar\omega^-}{2T_2} \right) \right] + (\mu_{1,2} \leftrightarrow \varepsilon_{1,2}), \quad (3)$$

где $\omega^- = \omega - k_x V$, $T_{1,2}$ – локальные температуры пластин в энергетических единицах, $q = \sqrt{k^2 - \omega^2/c^2}$, $q_{1,2} = \sqrt{k^2 - \varepsilon_{1,2}\mu_{1,2}\omega^2/c^2}$; при вычислении $\tilde{q}_2$ используется выражение для q_2 , в котором зависящие от ω величины берутся на частоте ω^- , а Q_m определяется выражением (a – ширина щели на рис. 1)

$$Q_m = (q + q_1/\mu_1)(q + \tilde{q}_2/\mu_2) \exp(qa) - (q - q_1/\mu_1)(q - \tilde{q}_2/\mu_2)(-qa). \quad (4)$$

Выражения для величин $(\mu_{1,2} \leftrightarrow \varepsilon_{1,2})$ в (2), (3) аналогичны первым слагаемым с надлежащими заменами. Они описывают вклады электромагнитных мод P -поляризации и при $a \leq 1$ мкм (для хорошо проводящих пластин) пренебрежимо малы по сравнению с вкладами мод S -поляризации, обусловленными вихревыми токами Фуко (первые слагаемые в (2), (3)). В дальнейшем металлы предполагаются немагнитными ($\mu_1 = \mu_2 = 1$), а вклады P -мод опускаются. Заметим еще, что в рассматриваемом нерелятивистском пределе $V/c \ll 1$ величины P_1 и P_2 непосредственно связаны со скоростями нагрева (охлаждения) пластин соотношениями $dQ_1/dt = -P_1$ и $dQ_2/dt = -P_2$.

Учитывая (1)–(4), для мощности силы трения $F_x V = P_1 + P_2$ получим

$$F_x V = \frac{\hbar}{4\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int d^2k (k_x V) \frac{|q|^2}{|Q_m|^2} \text{Im}(q_1) \text{Im}(\tilde{q}_2) \times \left[\text{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T_1} \right) - \text{cth} \left(\frac{\hbar\omega^-}{2T_2} \right) \right]. \quad (5)$$

При $T_1 = T_2$ скорости нагрева одинаковых пластин, вычисляемые по формулам (2), (3), равны, поэтому $F_x V = 2P_{1,2}$. Соответственно, можно находить силу трения по тепловому нагреву любой пластины. При $T_1 \neq T_2$, соответственно, $P_1 \neq P_2$, однако, в силу симметрии системы, выполняется соотношение $P_1(T_1, T_2) = P_2(T_2, T_1)$, поэтому $P_1(T_1, T_2) + P_2(T_1, T_2) = P_1(T_1, T_2) + P_1(T_2, T_1) = P_2(T_1, T_2) + P_2(T_2, T_1)$. Таким образом, и в этом случае достаточно контролировать кинетику нагрева только одной пластины.

В режиме квазитеплого равновесия $T_1 = T_2 = T$ и линейном приближении по скорости $F_x = -\eta V$ ($\eta = \text{const}$) из (5) следует более простое выражение для коэффициента трения

$$\eta = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 T} \int_0^\infty d\omega \sinh(\hbar\omega/2T)^{-2} \times \\ \times \int d^2 k k^3 |q|^2 \text{Im}(q_1) \text{Im}(q_2) |Q_m|^{-2}, \quad (6)$$

причем в (4) нужно сделать замену $\tilde{q}_2 \rightarrow q_2$. Соответственно, скорость нагрева каждой пластины будет определяться соотношением $dQ/dt = 0.5\eta V^2$. Эквивалентные формы (5), (6) в терминах френелевских коэффициентов отражения приведены в [9, 23].

Режим квантового трения пластин ($T_1 = T_2 = 0$) изначально является термически неравновесным, поскольку они должны нагреваться, увеличивая температуру. Формально из (5) следует (здесь ϕ – угол между вектором скорости и двумерным волновым вектором флуктуационного электромагнитного поля)

$$F_x = -\frac{\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^{\pi/2} d\phi \cos \phi \times \\ \times \int_0^{kV \cos \phi} d\omega \frac{|q|^2}{|Q_m|^2} \text{Im}(q_1) \text{Im}(\tilde{q}_2). \quad (7)$$

В этом случае, в рамках модели Друде для диэлектрической проницаемости металла (см. далее (13) и дополнительные материалы) сила трения возникает только при конечном остаточном сопротивлении ρ_0 с частотой релаксации ν_0 . Сила трения имеет асимптотику $F_x \sim V^3$ при $V \ll c\nu_0/\omega_p$, достигает максимума и быстро убывает при $V \gg \nu_0 a$. При $a = 10$ нм, в частности, величина максимума $\eta_{\text{max}} = 2.5 \cdot 10^{-8}$ кг/м² · с достигается при $V \approx 3.7\nu_0 a$, а при $V \ll c\nu_0/\omega_p$ из (7) следует

$$\eta = \frac{\hbar}{2^{12}\pi} \left(\frac{\omega_p}{c}\right)^4 \left(\frac{V}{a\nu_0}\right)^2. \quad (8)$$

Кинетика нагрева пластин в общем случае описывается уравнениями

$$P_1(T_1, T_2) \Delta t = -h\rho c_1(T_1) \Delta T_1, P_2(T_1, T_2) \Delta t = \\ = -h\rho c_2(T_2) \Delta T_2, \quad (9)$$

где $c_i(T_i)$ – зависящие от температуры удельные теплоемкости ($i = 1, 2$), h и ρ – толщина и плотность материала пластин, $P_i(T_1, T_2)$ определяются из (2), (3),

а приращения температуры ΔT_i соответствуют интервалу времени Δt . Из (9) также следует уравнение для определения зависимостей $T_2(T_1)$ или $T_1(T_2)$

$$\frac{dT_2}{dT_1} = \frac{P_1(T_1, T_2) c_1(T_1)}{P_2(T_1, T_2) c_2(T_2)}. \quad (10)$$

В случае одинаковых пластин в (10) можно сделать замену $P_2(T_1, T_2) \rightarrow P_1(T_2, T_1)$ или $P_1(T_1, T_2) \rightarrow P_2(T_2, T_1)$. При записи уравнений (9), (10) учтено, что, в силу высокой теплопроводности, скорость нагрева пластин за счет радиационной передачи тепла значительно меньше скорости диффузии тепла в их объемах. Поэтому в каждый фиксированный момент времени пластины имеют одинаковую температуру во всех точках. В самом деле, из уравнения тепловой диффузии $\partial T/\partial t = a^2 \partial^2 T/\partial z^2$ по нормали к пластинам следует, что характерное время установления теплового равновесия составляет $\tau = h^2/a^2$, где $a^2 = \kappa/c\rho$, κ – коэффициент теплопроводности. Тогда $\tau = h^2 c\rho/\kappa$ и, например, в случае золота при $T = 10$ К и $h = 500$ мкм ($c = 2.2$ Дж/кг · К, $\kappa = 3200$ Вт/м · К, $\rho = 19.8 \cdot 10^3$ кг/м³ [24]) получим оценку $\tau \simeq 3$ мкс, в то время как кинетика нагрева за счет трения характеризуется десятками секунд или минутами, в зависимости от скорости и других параметров (см. далее).

Для одинаковых пластин с одинаковой начальной температурой T_0 , полагая $P_i(T, T) = -0.5\eta(T, V)V^2$, из (9) получим

$$t = \frac{2h\rho}{V^2} \int_{T_0}^T \frac{c(T)}{\eta(T, V)} dT, \quad (11)$$

где t – время нагрева от температуры T_0 до температуры T . В простейшем случае $\eta = \text{const}$ и $(T) = a_1 T + a_2 T^3$ из (11) следует

$$T(t) = (-\beta + \sqrt{\beta^2 + T_0^4 + 2\beta T_0^2 + 2\eta V^2 t/h\rho a_2})^{1/2}, \quad (12)$$

где $\beta = a_1/a_2$.

Для проведения численных расчетов коэффициентов трения и скоростей нагрева используем приближение Друде для диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ материала пластин

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i \cdot \nu(T))}, \quad (13)$$

где ω_p – плазменная частота, а $\nu(T) = \omega_p^2 \rho(T)/4\pi$ – частота релаксации электронов металла с удельным сопротивлением $\rho(T)$. Характерные зависимости $\rho(T)$ для золота с нулевым и конечным остаточным

сопротивлением $\rho_0 = 2.3 \cdot 10^{-10}$ Ом·м показаны на рис. S1 (см. дополнительные материалы). Они соответствуют приближению Блоха–Грюнайзена [25] и модифицированному приближению Блоха–Грюнайзена [26] (далее обозначаемые BG и BGM).

Примеры расчета скоростей нагрева и коэффициентов трения $\eta = F_x/V$ по формулам (2)–(6) для одинаковых пластин золота показаны на рис. 2 (модель

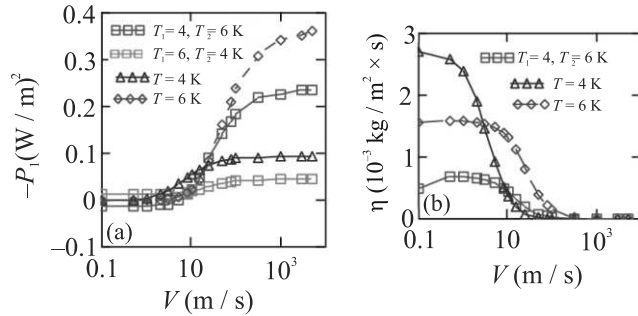


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости скорости нагрева (а) и коэффициента трения (б) пластины 1 от скорости движения пластины 2 в модели BG при разных тепловых условиях. Конфигурации $T_1 = 6$, $T_2 = 4$ К и $T_1 = 4$, $T_2 = 6$ К имеют одинаковый коэффициент трения. Конфигурации $T = 4$ К и $T = 6$ К соответствуют квазистационарному тепловому режиму. Значения P_1 и η на кривых с символами Δ (а) и $\diamond$ (б) увеличены в 3 раза

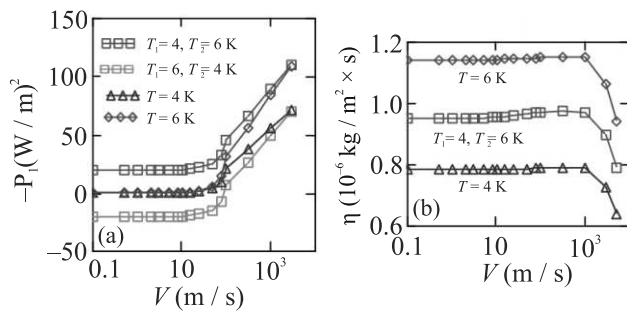


Рис. 3. Зависимости скорости нагрева (а) и коэффициента трения (б) пластины 1 от скорости движения пластины 2 в модели BGM при разных тепловых условиях. Конфигурации $T_1 = 6$, $T_2 = 4$ К и $T_1 = 4$, $T_2 = 6$ К имеют одинаковый коэффициент трения. Конфигурации $T = 4$ К и $T = 6$ К соответствуют квазистационарному тепловому режиму

BG) и рис. 3 (модель BGM). Во всех расчетах, если не оговорено, использовано значение ширины щели $a = 10$ нм. Детали вычисления интегралов в (2), (3), (5) приведены в дополнительных материалах. Заметим, что на расстояниях $a > 10$ нм практически отсутствуют процессы экстремального теплообмена и трения, обусловленные туннелированием электронов и фононов [27, 28] и другими эффектами [9, 29–31].

Из рисунков 2, 3 видно, что при $V < 10$ м/с (рис. 2а) и $V < 10^3$ м/с (рис. 3а) скорости нагрева пластин 1 и 2 имеют разный знак, будучи равны по модулю: пластина 1 нагревается, а пластина 2 охлаждается в соответствии с их температурами $T_1 = 4$ К и $T_2 = 6$ К. При этом коэффициенты трения слабо зависят от скорости V (рис. 2б, 3б). Если скорость верхней пластины превышает ранее указанные значения, то обе пластины нагреваются быстрее, причем наблюдается “аномальный” нагрев движущейся пластины 2: ее температура увеличивается, хотя температура неподвижной пластины 1 меньше (скорость нагрева пластины 2 при $T_1 = 4$, $T_2 = 6$ К соответствует скорости нагрева пластины 1 при $T_1 = 6$, $T_2 = 4$ К). Эта ситуация аналогична случаю нагрева металлической частицы золота, движущейся над поверхностью золота [21]. Однако при $T_1 = 4$, $T_2 = 6$ К скорость нагрева неподвижной пластины 1 (верхняя кривая с $\square$) выше скорости нагрева движущейся пластины 2 (нижняя кривая с $\square$), поэтому ее температура “догоняет” температуру последней, и затем обе пластины нагреваются с одинаковой скоростью.

При достаточно высоких скоростях движения пластины 2 коэффициенты трения быстро убывают (рис. 2б, 3б). Это связано с влиянием доплеровской частоты $\omega^- = \omega - k_x V = \omega - kV \cos \phi$ в (5). Характерные значения двумерного волнового вектора в данной ситуации составляют $k \sim 1/a$, а величина частоты поглощения при низких температурах $\omega \sim \nu(T)$. Поэтому частота ω^- становится знакопеременной при $V > \nu(T)a$. Тепловой фактор в (5) также становится знакопеременным, что приводит к уменьшению коэффициента трения. При этом характерная величина скорости V для “излома” (максимума) зависимости $\eta(V)$ коррелирует с величиной удельного сопротивления, так как $\nu(T) \sim \rho(T)$. Отношение сопротивлений $\rho_{\text{BGM}}/\rho_{\text{BG}}$ при температурах $T \sim 4 \div 10$ К как раз и составляет два-три порядка величины (см. дополнительные материалы). В то же время отношение коэффициентов трения $\eta_{\text{BGM}}/\eta_{\text{BG}}$ находится в обратной пропорции, поскольку при $\nu(T) < T$ и $V < \nu(T)a$ возникает нетривиальная обратно-пропорциональная зависимость коэффициента трения от удельного сопротивления ρ ($\eta \sim \rho^{-0.8}$ в линейном по скорости приближении для силы трения [19, 20], см. подробнее дополнительные материалы). Эта зависимость обусловлена смещением характерной частоты поглощения металла в область частот ниже частоты Вина с высокой плотностью электромагнитных мод и возрастанием глубины проникновения электромагнитных мод S -поляризации. Значительный рост коэффициента трения с уменьшени-

ем температуры ожидается и при движении малой металлической частицы вблизи поверхности металла [21]. При дальнейшем уменьшении температуры одно или оба указанных выше условия перестают выполняться, и коэффициент трения уменьшается. Это подтверждается результатами расчета коэффициента трения в зависимости от температуры и ширины щели, приведенными в дополнительных материалах (см. табл. S1): наблюдается значительный рост η при $T < \theta_D$, более резкий в модели BG. Зависимость от a близка к обратно-пропорциональной ($\eta \propto a^{-1}$). Это согласуется с расчетами [19, 20]. В целом, как следует из расчетов для всех рассмотренных температур и скоростей, максимальные значения коэффициента трения η в области максимума (в моделях BG и BGM) составляют $10^{-3} \div 10^{-6}$ кг/м³.

При $T_1 \neq T_2$ величина скоростей нагрева (охлаждения) пластин оказывается значительно выше, чем при квазитепловом равновесии (рис. 2, 3, кривые с символами $\square$), поэтому кинетика передачи тепла, в соответствии с (9), характеризуется значительно меньшими временами. В начальной области зависимостей P_1 и P_2 от скорости V , когда $P_1(T_1, T_2) = -P_2(T_1, T_2) \approx \text{const}$ (рис. 2а и 3а), можно приравнять левые части уравнений (9). Тогда, полагая $c_{1,2}(T) = a_1 T + a_2 T^3$, для квазистационарной температуры пластин получим

$$T = \left(-\beta + \sqrt{\beta^2 + \beta(T_1^2 + T_2^2) + T_1^4 + T_2^4} \right)^{1/2}, \quad (14)$$

где T_1 и T_2 – начальные температуры. После установления квазитеплового равновесия температура пластин будет возрастать в соответствии с (11)–(12). Результаты расчета времени нагрева пластин при численном интегрировании (10) от 4 до 5 К и от 4 до 6 К показаны на рис. 4. Значения параметров $a_1 = 0.0035$ Дж/кг · К², $a_2 = 0.0023$ Дж/кг · К⁴ и $\beta = 1.5$ для золота в диапазоне температур 1 ÷ 20 К были получены по данным [24]. Как видно из рисунка, достаточно “комфортные” значения времени нагрева пластин можно получить в диапазоне скоростей $10 \div 10^3$ м/с.

Преимущество низкотемпературных тепловых измерений по сравнению с комнатными условиями, помимо уменьшения шума и других нежелательных эффектов, связано с тем, что во втором случае время нагрева становится неприемлемо большим из-за значительно меньшей силы трения и скорости нагрева, приводящих к возрастанию подынтегральной функции в (10). Так, нагрев на 1 К при $T_0 = 300$ К, $a = 10$ нм, $V = 1000$ м/с потребует около 2 ч, тогда

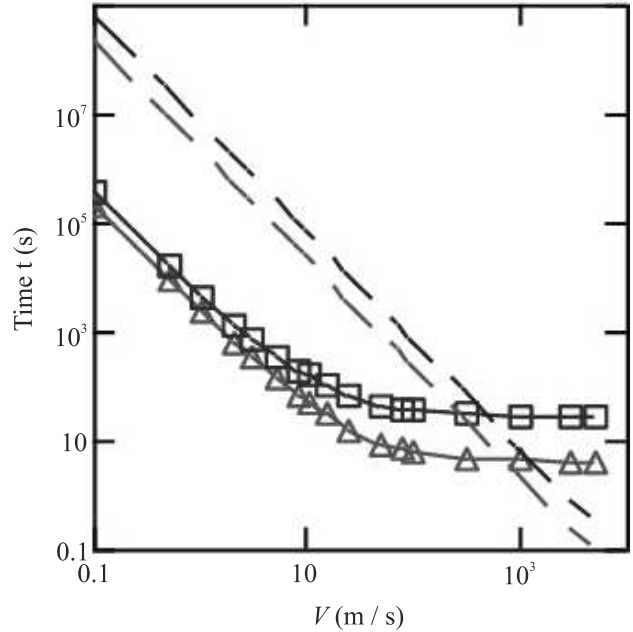


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость времени нагрева пластин золота от скорости движения одной из них при $a = 10$ нм и $h = 500$ мкм. Штриховые линии – модель BGM: нагрев от 4 до 6 К (верхняя) и от 4 до 5 К (нижняя). Линии с символами – модель BG: нагрев от 4 до 6 К (верхняя) и от 4 до 5 К (нижняя).

как нагрев от 4 до 5 К при таких же других условиях займет менее 10 с (рис. 4).

Как отмечалось в начале статьи, недостатками “маятниковой” схемы измерений силы трения с АСМ [12] является низкая скорость зонда и малая эффективная площадь взаимодействия. В этой связи, аналогично [15–17], представляется перспективным увеличение скорости за счет вращения. Так, в [17] предполагается использовать диск с диаметром ~ 10 см, вращающийся с частотой до 10^4 об/с. В нашем случае возможная схема может включать два соосных диска в общем термостате, один из которых может вращаться с угловой скоростью Ω (см. дополнительные материалы, рис. S2). Неинерциальность системы отсчета вращающегося диска не влияет на скорости нагрева, рассчитываемые по формулам (2), (3), так как частота вращения значительно меньше характерных частот флуктуационного электромагнитного поля в вакуумном зазоре. Возможным сценарием измерений является вариант квазистационарного температурного режима, когда температуры пластин возрастают с одинаковой скоростью от начальной температуры T_0 . Время нагрева варьируется путем изменения скорости V , ширины щели a , геометрических размеров активной зоны взаимодействия и материальных свойств пластин.

Закключение. Одинаковые металлические пластины, разделенные узким вакуумным промежутком с шириной ~ 10 нм и более, имеющие одинаковую начальную температуру и движущиеся относительно друг друга с нерелятивистской скоростью, нагреваются одинаково быстро за счет работы силы флуктуационного электромагнитного поля – силы трения Казимира–Лифшица. Пластины, имеющие разные начальные температуры, быстро приходят к состоянию квазитеплового равновесия, продолжая нагреваться. Величина силы трения и скорости нагрева пластин значительно возрастают с уменьшением температуры до некоторого предела, зависящего от скорости и остаточного сопротивления металла, а затем изменяются в квантовом режиме ($T = 0$), когда сила трения изменяется пропорционально кубу скорости при низких скоростях (< 1 м/с), достигает максимума и резко убывает при высоких скоростях ($> 10^3\text{--}10^4$ м/с). Сила трения пластин золота может быть измерена по их нагреву на $1 \div 2$ К (с временем нагрева менее 1 мин) при температурах $T < 10$ К в системе двух соосных дисков с диаметром ~ 10 см, один из которых вращается с частотой $10 \div 10^3$ об/с.

Автор благодарен К. Хенкелю (С. Henkel) за предоставленные данные о сопротивлении золота и обсуждение предварительных результатов работы.

1. H. B. G. Casimir, Proc. Kon. Ned. Akad. Wet. B **51**, 793 (1948).
2. E. M. Lifshitz, ZhETF **29**, 94 (1955) [Sov. Phys. JETP **2**, 73 (1956)].
3. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **62**, 1742 (1989).
4. V. V. Dodonov, A. B. Klimov, and V. I. Man'ko, Phys. Lett. A **142**, 511 (1989).
5. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. USA **89**, 4091 (1992).
6. V. Dodonov, Physics **2**, 67 (2020).
7. V. M. Mostepanenko, Universe **7**, 84 (2021).
8. D. Reiche, F. Intravaia, and K. Busch, APL Photonics **7**, 030902 (2022).
9. A. I. Volokitin and B. N. J. Persson, Rev. Mod. Phys. **79**, 1291 (2007).
10. J. S. Høye, I. Brevik, and K. A. Milton, Symmetry **8**, 29 (2016).
11. J. B. Pendry, J. Phys. C: Condens. Matter **9**, 10301 (1997).
12. B. C. Stipe, T. D. Stowe, T. W. Kenny, and D. Rugar, Phys. Rev. Lett. **87**, 096901 (2001).
13. А. И. Волокитин, Письма в ЖЭТФ **104**(7), 534 (2016).
14. А. И. Волокитин, Письма в ЖЭТФ **110**(6), 379 (2019).
15. K. Viotti, M. B. Farias, P. I. Villar, and F. C. Lombardo, Phys. Rev. D **99**, 105005 (2019).
16. M. B. Farias, F. C. Lombardo, A. A. Soba, P. I. Villar, and R. S. Decca, Nature PJ Quant. Information **6**, 25 (2020).
17. F. C. Lombardo, R. S. Decca, L. Viotti, and P. I. Villar, Adv. Quant. Tech. **4**, 2000155 (2021).
18. M. V. Gurudev Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and D. Lukin, Science **316**(5829), 1312 (2007).
19. Г. В. Дедков, Письма в ЖЭТФ **114**(11), 779 (2021).
20. G. V. Dedkov, Universe **7**, 427 (2021).
21. G. V. Dedkov, Appl. Phys. Lett. **121**, 231603 (2022).
22. В. Г. Полевой, ЖЭТФ **98**, 1990 (1990).
23. G. V. Dedkov and A. A. Kyasov, Chin. Phys. **56**, 3002 (2018).
24. *Физические величины*. Справочник под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, М. (1991).
25. *Handbook of Physics*, ed. by E. U. Condon and H. Odishaw, McGraw Hill, N.Y. (1967).
26. J. Baptiste, in *The Physics Factbook*, ed. by G. Elert (2004); (<https://hypertextbook.com/facts/2004/JennelleBaptiste.shtml>).
27. S.-A. Biehs, A. Kittel, and P. Ben-Abdallah, Z. Naturforsch. **75**, 802 (2020).
28. M. G. Vioria, Y. Guo, S. Merabia, P. Ben-Abdallah, and R. Messina, arXiv: 2212.03073.
29. J. B. Pendry, K. Sasiithlu, and R. V. Craster, Phys. Rev. B **94**, 075414 (2016).
30. K. Sasiithlu, J. B. Pendry, and R. W. Craster, Z. Naturforsch. **72**, 181 (2017).
31. S. Kuehn, R. F. Loring, and J. A. Marohn, Phys. Rev. Lett. **96**, 156103 (2006).

Содержание

Том 117, выпуск 11

Поля, частицы, ядра

- Гауштейн В.В., Василишин Б.И., Дарвиш Э., Зеваков С.А., Кузин М.Я., Кузьменко А.С., Левчук М.И., Логинов А.Ю., Николенко Д.М., Рачек И.А., Топорков Д.К., Юрченко А.В., Фикс А.И., Шестаков Ю.В. Измерение T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности реакции некогерентного фоторождения π^- -мезона на дейтроне 803

Оптика, лазерная физика

- Дмитриев А.А., Барышникова К.Б., Рыбин М.В. О возможности изготовления $\mathcal{PT}$ -симметричных оптических димеров без поглощающего свет материала 808

- Асеев С.А., Миронов Б.Н., Кочиков И.В., Лотин А.А., Ищенко А.А., Рябов Е.А. Сверхтонкий кристалл теллурида германия в сильном фемтосекундном лазерном поле: проявление квантоворазмерного эффекта 814

- Баженев А.Ю., Никитина М.М., Царёв Д.В., Алоджанц А.П. Случайный лазер на основе материалов в виде сложных сетевых структур 819

- Емельянец П.С., Пышков Н.И., Свяховский С.Е. Построение структуры одномерного фотонного кристалла по заданному спектру коэффициента отражения 826

Конденсированное состояние

- Путилов А.В., Миронов С.В., Мельников А.С., Беспалов А.А. Обратный эффект Фарадея в сверхпроводниках с конечной щелью в спектре возбуждений 832

- Бражкин В.В., Данилов И.В., Циок О.Б. Тайны воды и других аномальных жидкостей: “медленный” звук, релаксирующие сжимаемость и теплоемкость (Миниобзор) 840

- Фоминых Н.А., Стегайлов В.В. Поляроны и перенос заряда в хромите FeCr_2O_4 в рамках DFT + U 857

- Belozerov A.S., Anisimov V.I. Electron correlation effects in paramagnetic cobalt 863

Квантовая информатика

- Liu X.-Q., Liu J., Xue Z.-Y. Robust and fast quantum state transfer on superconducting circuits .. 865

- Миннегалиев М.М., Герасимов К.И., Моисеев С.А. Реализация протокола квантовой памяти на основе восстановления сигнала подавленного эха в ортогональной геометрии на телекоммуникационной длине волны 867

Биофизика

Мартirosян Д.Ю., Осыченко А.А., Залесский А.Д., Калинина О.Т., Точи́ло У.А., Федотов Ю.А., Сырчина М.С., Надточенко В.А. Использование флуоресцентного красителя для управления лазерным поглощением в фемтосекундной лазерной нанохирургии клеток	876
--	-----

Содержание

Том 117, выпуск 12

Поля, частицы, ядра

Donchenko G.V., Kouzakov K.A., Studenikin A.I. Elastic neutrino-atom scattering as a probe of neutrino millicharge and magnetic moment	885
Криворученко М.И., Тырин К.С., Карпешин Ф.Ф. Энергетический спектр β -электронов в безнейтринном двойном β -распаде с учетом возбуждения электронной оболочки атомов	887
Salnikov D., Satunin P., Fitkevich M., Kirpichnikov D.V. Light-shining-through-wall cavity setups for probing ALPs	892
Осипов А.А. Глюонная аномалия и нарушение правила Цвейга	894
Мильштейн А.И., Сальников С.Г. Естественное объяснение недавних результатов исследования $e^+e^- \rightarrow \Lambda\bar{\Lambda}$	901

Оптика, лазерная физика

Львов К.В., Стремоухов С.Ю. Учет энергетического распределения свободных носителей в скоростных уравнениях, описывающих их динамику при взаимодействии диэлектриков с мощным лазерным излучением	904
--	-----

Конденсированное состояние

Миньков Г.М., Рут О.Э., Шерстобитов А.А., Дворецкий С.А., Михайлов Н.Н., Алешкин В.Я. Энергетический спектр валентной зоны в квантовых ямах HgTe на пути от 2D к 3D топологическому изолятору	912
Орлов Ю.С., Николаев С.В., Овчинников С.Г. Фотоусиление экситонного упорядочения в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером	919
Зобов В.Е., Лундин А.А. Зависимость скорости релаксации когерентных состояний от числа коррелированных спинов и порядка когерентности	929
Дорожкин С.И., Капустин А.А., Федоров И.Б., Уманский В., Смет Ю.Х. Гигантское пространственное перераспределение электронов в широкой квантовой яме, индуцированное квантующим магнитным полем	935

Методы теоретической физики

Попова А.П., Попов И.С., Чемерис С.П., Прудников В.В., Прудников П.В. Эффекты памяти в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели в низкотемпературной фазе Березинского	943
---	-----

Разное

Дедков Г.В. Сила трения Казимира–Лифшица и кинетика радиационного теплообмена металлических пластин при относительном движении	950
--	-----