

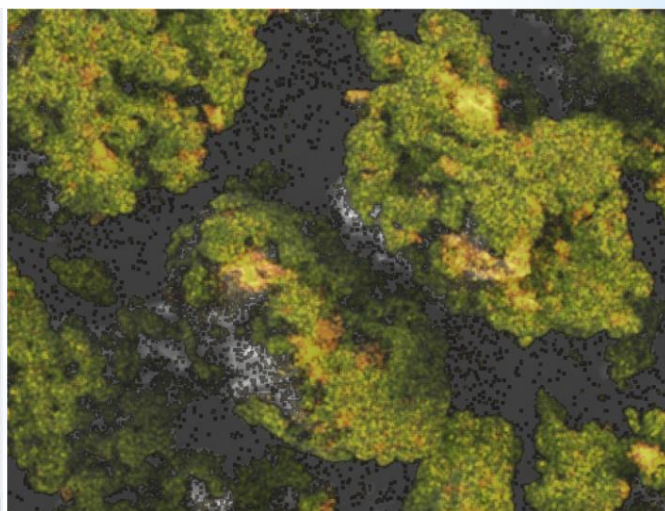
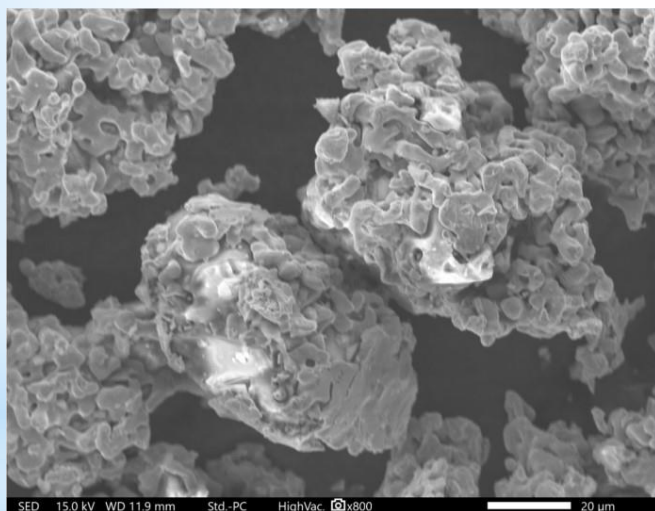


Издательство ИТПЗ РАН

ISSN 2949-0553

СОВРЕМЕННАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

научный рецензируемый журнал



СТЕКЛОМЕТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОРОШКОВЫЙ ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ
ПРИМЕНЕНИЯ В КОМПОЗИТАХ, ПРЕДНАЗНАЧЕННЫХ ДЛЯ СВЧ ДИАПАЗОНА
Р.А. Князьков, С.Н. Старостенко, А.В. Артемова, И.В. Комаров, А.В. Долматов,
А.О. Ширяев, П.А. Иванов, А.В. Осипов, Д.А. Петров, С.А. Маклаков, П.А. Зезюлина,
Н.А. Бузников, С.С. Маклаков

2024

№ 4 (12)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной электродинамики
Российской академии наук

Журнал основан в 2022 году

Выпуск № 4 (12)

Современная электродинамика

научный рецензируемый журнал

Под редакцией академика РАН А.Н. Лагарькова

Москва, 2024

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук

ISSN 2949-0553

Современная электродинамика

Научный рецензируемый журнал. Издаётся с октября 2022 года.

Выходит один раз в два месяца.

№ 4 (12)

2024

Главный редактор академик РАН А.Н.Лагарьков

Редакционная коллегия: к.т.н. Н.П. Балабуха, к.т.н. К.М. Басков, д.ф.-м.н. А.П. Виноградов, д.ф.-м.н. А.А. Дорофеенко, д.ф.-м.н. В.Н. Кисель, к.ф.-м.н. К.И. Кугель, д.ф.-м.н. А.М. Мерзликин, д.ф.-м.н. А.А. Пухов, д.ф.-м.н. А.Л. Рахманов, д.ф.-м.н. А.В. Рожков, д.ф.-м.н. К.Н. Розанов, к.т.н. И.А. Рыжиков, д.ф.-м.н. А.К. Сарычев

Адрес редакции:

125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр. 6

тел., факс 8 (495) 484-26-33

эл.почта electrodynamics@mail.ru

Зав. редакцией Е.В. Зеневич

Компьютерная вёрстка: Е.В. Зеневич

Свидетельство о регистрации Эл № ФС77-83666 от 26.07.2022 г.

Подписано в печать 19.09.2024. Тираж 30 экз.

© ИТПЭ РАН, 2024

Содержание номера

Памяти Владимира Сергеевича Солосина	4
1 Теоретическая электродинамика	6
Дресвянкин Д.Н., Рожков А.В., Сбойчаков А.О. ГРАФЕН НА ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПОДЛОЖКЕ: НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ	6
2 Вопросы экспериментальной электродинамики	21
Князьков Р.А., Старостенко С.Н., Артемова А.В., Комаров И.В., Долма- тов А.В., Ширяев А.О., Иванов П.А., Осипов А.В., Петров Д.А., Макла- ков С.А., Зезюлина П.А., Бузников Н.А., Маклаков С.С. СТЕКЛОМЕТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОРОШКОВЫЙ ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КОМПОЗИТАХ, ПРЕДНАЗНА- ЧЕННЫХ ДЛЯ СВЧ ДИАПАЗОНА	21
3 Методические заметки	30
Виноградов А.П., Андрианов Е.С. МОГУТ ЛИ ГАРМОНИКИ ФЛОКЕ РАССМАТРИВАТЬСЯ КАК ВИР- ТУАЛЬНЫЕ УРОВНИ, ВВОДИМЫЕ ДЛЯ ОБЪЯСНЕНИЯ КОМБИ- НАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ?	30

ПАМЯТИ ВЛАДИМИРА СЕРГЕЕВИЧА СОЛОСИНА

(28.05.1953 - 17.07.2024)



На фото 1: Владимир Сергеевич Солосин

17 июля 2024 года скоропостижно и безвременно ушел из жизни ведущий научный сотрудник Института теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук (ИТПЭ РАН), кандидат физико-математических наук, член редакционного совета журнала «Современная электродинамика» Владимир Сергеевич Солосин.

В.С. Солосин родился 28 мая 1953 в г. Борисов Белорусской ССР. Радиофизикой увлекся в школьные годы, проведенные на севере, в г. Мирном, где отец – военный инженер – проходил службу. Закончив факультет радиотехники и кибернетики Московского физико-технического института (МФТИ), Владимир Сергеевич начал работать во Фрязинском отделении института радиотехники и электроники Академии наук (ныне ФИРЭ РАН). Еще будучи студентом В.С. Солосин попал в отдел, возглавляемый Б.З. Каценеленбаумом. Однако вскоре Владимир Сергеевич, почувствовав тягу к экспериментальным исследованиям, перешел в научную группу Ю.Н. Казанцева. Под руководством Ю.Н. Казанцева он занимался вопросами распространения электромагнитных волн в волноведущих структурах. В.С. Солосиным была проведена модификация, оптимизация конструкции квазиоптического рефлектометра, использующегося для измерения диэлектрической и магнитной проницаемостей плоских образцов материалов. В 2004 году защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по теме «Рефлектометрия на основе полых металлодиэлектрических волноводов».

С 1996 года Владимир Сергеевич сотрудничал с ИТПЭ РАН, участвуя в проектах по разработке и созданию измерительных комплексов в России и за рубежом. Он принимал активное участие в создании компактных полигонов, обеспечивающих измерение характеристик рассеяния объектов с

высокой точностью в постоянном объеме в рабочей полосе частот, в Сингапуре, в Хайдарабаде (Индия), в Жуковском, в Санкт-Петербурге и других городах. С 2005 года стал ведущим научным сотрудником ИТПЭ РАН.

В.С. Солосин посвятил жизнь радиофизике. Он является автором более 150 научных работ. Его разработки в волноводной технике, уникальные устройства и методики для измерения параметров материалов были внедрены в жизнь. Владимир Сергеевич является автором более 6 патентов и авторских свидетельств. Научные интересы В.С. Солосина простирались на обширную область радиофизики, включающую в себя и проведение численных исследований характеристик распространения электромагнитных волн в СВЧ структурах, и проведение измерений характеристик рассеяния и излучения объектов, а также разработку методик для этих измерений.

Владимир Сергеевич участвовал в разработке и создании уникальных измерительных комплексов, позволяющих проводить экспериментальные исследования характеристик рассеяния и излучения объектов на высочайшем техническом уровне. Разработанные им кромки зеркал коллиматоров всегда эффективно снижали влияние дифракционных эффектов на распределение поля в рабочей зоне измерительного комплекса. Звездообразная кромка зеркала коллиматора МАРК-12, автоматизированного измерительного комплекса – компактного полигона ИТПЭ РАН, разработанная им в рамках модернизации комплекса в 2022 году, будет напоминать о вкладе ее автора в развитие радиофизических измерений в нашей стране.

Помимо научной деятельности В.С. Солосин активно занимался преподавательской работой. Студентам МФТИ он читал курс «Экспериментальные методы электродинамики». Преподавательский талант Владимира Сергеевича позволял вовлекать студентов в научный процесс, он воспитал не одно поколение радиофизиков. Под руководством Владимира Сергеевича было подготовлено более 10 дипломных работ студентов МФТИ. Он также участвовал в обсуждении студенческих работ кафедры математики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Личные человеческие качества Владимира Сергеевича вызывали у всех, кто его знал, искреннее уважение и симпатию, превращали общение с ним в удовольствие. Он имел прекрасное чувство юмора и позитивный настрой на работу, всегда был контактен, коммуникабелен, инициативен, искал и находил новые подходы к решению возникающих проблем, и поэтому пользовался заслуженным авторитетом и уважением в коллективе.

В.С. Солосин был доброжелательным, отзывчивым и вежливым человеком, обладавшим энциклопедическими знаниями. Все, кому довелось с ним общаться, помнят его прекрасное чувство юмора, позитивный настрой, умение поддержать и дать ценный совет. Владимир Сергеевич был очень ответственным человеком, стремящимся любые работы, за которые он брался, выполнить на высочайшем научно-техническом уровне.

Редакция и редколлегия журнала «Современная электродинамика» выражают искренние соболезнования родным и близким Владимира Сергеевича.

ГРАФЕН НА ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПОДЛОЖКЕ: НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ

Д.Н. Дресвянкин¹, А.В. Рожков * ², А.О. Сбойчаков²

¹Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 02.09.2024

Одобрена после рецензирования 05.09.2024

Принята к публикации 18.09.2024

Аннотация

Ранее мы показали [Письма в ЖЭТФ, 114, 824 (2021)], что образец графена, помещенный на ферромагнитную подложку, демонстрирует многочастичную магнитно-электронную неустойчивость. Эта неустойчивость образует щель в электронном спектре и вызывает подкос у вектора намагниченности вблизи границы раздела графен - подложка. В данной работе мы доказываем, что взаимодействие между электронами в графене значительно усиливает эту неустойчивость. Из наших расчетов следует, что в присутствии даже умеренного взаимодействия неустойчивость может быть достаточно выраженной, чтобы быть обнаруженной экспериментально в реалистичных условиях.

Ключевые слова: графен, ферромагнитная подложка, подкос намагниченности, магнитно-электронная неустойчивость, волна спиновой плотности, щель в спектре

EDN TTNXCI

doi:[10.24412/2949-0553-2024-412-06-20](https://doi.org/10.24412/2949-0553-2024-412-06-20)

I. Введение

Лист графена, помещенный на ферромагнитную диэлектрическую подложку [1–4], можно рассматривать как перспективную систему для спинтроники [5]. В такой гетероструктуре из-за эффекта магнитной близости спины электронов графена поляризуются, что сопровождается возникновением поверхностей Ферми в обеих точках Дирака, превращая графен, который является полуметаллом в своем исходном виде, в самолегируемый металл. Экспериментальное исследование такого магнитного металла на основе графена было описано, например, в работе [2]. В статьях [6–8] также можно найти теоретические исследования этой системы.

Ранее [9] мы теоретически продемонстрировали, что при низкой температуре образец графена, помещенный на диэлектрическую ферромагнитную подложку, испытывает многочастичную магнитно-электронную неустойчивость: из-за совпадения дырочных и электронных поверхностей Ферми (такая особенность спектра называется «нестинг»), идеальная однородная ферромагнитная поляризация графена и подложки начинает испытывать подкос, что приводит к образованию щели в одноэлектронном спектре графена. В результате указанной неустойчивости магнитный металл переходит в полупроводящее магнитное состояние. В работе [9] мы намеренно рассматривали упрощенную модель, позволяющую дать наглядное объяснение механизма неустойчивости. Теперь же мы представляем более точное описание рассматриваемого явления.

Упрощения, используемые в теоретической модели [9], делятся на два типа: (i) все одноэлектронные состояния, энергии $\epsilon_{\mathbf{k}}$ которых лежат слишком далеко от энергии Ферми, не учитываются при рассмотрении (в частности, были отброшены все состояния с $|\epsilon_{\mathbf{k}}|$, превышающим ~ 1 эВ); (ii) модель не учитывает электрон-электронное взаимодействие в графене. Из этих двух предположений, (i) является чисто техническим и используется для обоснования использования линейной плотности состояний для графена. От этого можно отказаться, не вводя новых концепций в формализм модели [9]. Ситуация с (ii) более сложная и требует усложнения теоретического аппарата.

* Автор, ответственный за переписку: Александр Владимирович Рожков, alex.vl.rozhkov@yandex.ru

В настоящей статье мы избавимся и от (i), и от (ii). А именно, мы используем плотность состояний сильной связи для учета всех p_z электронных состояний. Но что самое главное, мы явно включим электрон-электронное отталкивание в модель. Затем мы применим теорию среднего поля для изучения сформулированной модели.

Мы увидим, что обе модификации формализма приводят к усилению неустойчивости и возрастанию величины щели по сравнению с выражениями, полученными в работе [9]. Это даёт возможность с большей уверенностью утверждать, что неустойчивость может наблюдаться в эксперименте при реалистичных условиях.

Помимо этого, наш формализм позволяет нам выявить кроссовер между магнитно-электронной неустойчивостью (которая обусловлена взаимодействием между магнитной и электронной подсистемами) и более распространенной неустойчивостью волны спиновой плотности, которая имеет чисто электронное происхождение.

Данная работа организована следующим образом. В разделе II мы описываем геометрические аспекты исследуемой гетероструктуры. Модельный гамильтониан представлен в разделе III. Магнитно-электронная неустойчивость обсуждается в разделе IV, а эффекты электрон-электронного взаимодействия исследуются в разделе V. Раздел VI содержит обсуждения основных результатов статьи и выводы. Технически сложные расчеты отнесены в Приложения.

II. Рассматриваемая геометрия

Основным объектом нашего исследования является образец графена, размещенный на ферромагнитной непроводящей подложке. Ниже мы предполагаем, что графен лежит в плоскости Oyz , а ось Ox перпендикулярна подложке, см. рис. 1(a). Это «неканоническая» ориентация системы координат (обычно предполагается, что графен расположен в плоскости Oxy). Однако наш выбор делает описание магнитной подсистемы более привычным, поскольку позволит использовать Oz в качестве оси квантования спина. Символы $\hat{e}_{x,y,z}$ обозначают единичные векторы в направлении соответствующих осей. Для задания точки на поверхности подложки мы будем использовать двумерные векторы $\mathbf{R} = y\hat{e}_y + z\hat{e}_z$, а точка внутри подложки задается вектором $\mathbf{r} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y + z\hat{e}_z$, $x < 0$, где плоскость $x = 0$ соответствует поверхности подложки.

Решетка графена описывается элементарными векторами трансляции:

$$\mathbf{a}_{1,2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a_0 \left(\sqrt{3}\hat{e}_y \pm \hat{e}_z \right), \quad (1)$$

где a_0 – расстояние между ближайшими атомами углерода в решетке графена. Координаты узлов решетки на подрешетках A и B задаются векторами:

$$\mathbf{R}_{A,B} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2 \mp a_0 \hat{e}_y, \quad n_{1,2} \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

На рис. 1 узлы решетки, соответствующие разным подрешеткам, изображены разными цветами. Наконец, напомним, что зона Бриллюэна в графене имеет форму правильного шестиугольника, а выражение

$$\mathbf{b}_{1,2} = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{e}_y \pm \sqrt{3}\hat{e}_z) \quad (3)$$

характеризует соответствующие вектора обратной решетки.

III. Модель графена на ферромагнитной подложке

Модельный гамильтониан, описывающий поведение электронов в графене, помещенном на ферромагнитную подложку, задается следующим выражением:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_Z + \hat{H}_{\text{HB}}. \quad (4)$$

Здесь $\hat{H}_0$ — хорошо известный гамильтониан сильной связи для графена:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle, \sigma} \hat{d}_{\mathbf{R}_A \sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{R}_B \sigma} + \text{H.c.} \quad (5)$$

В этом выражении суммирование идет по парам ближайших соседей $\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle$ и по проекции спина σ . Символ t обозначает интеграл перескока (для расчетов можно использовать $t \approx 2.7$ эВ).

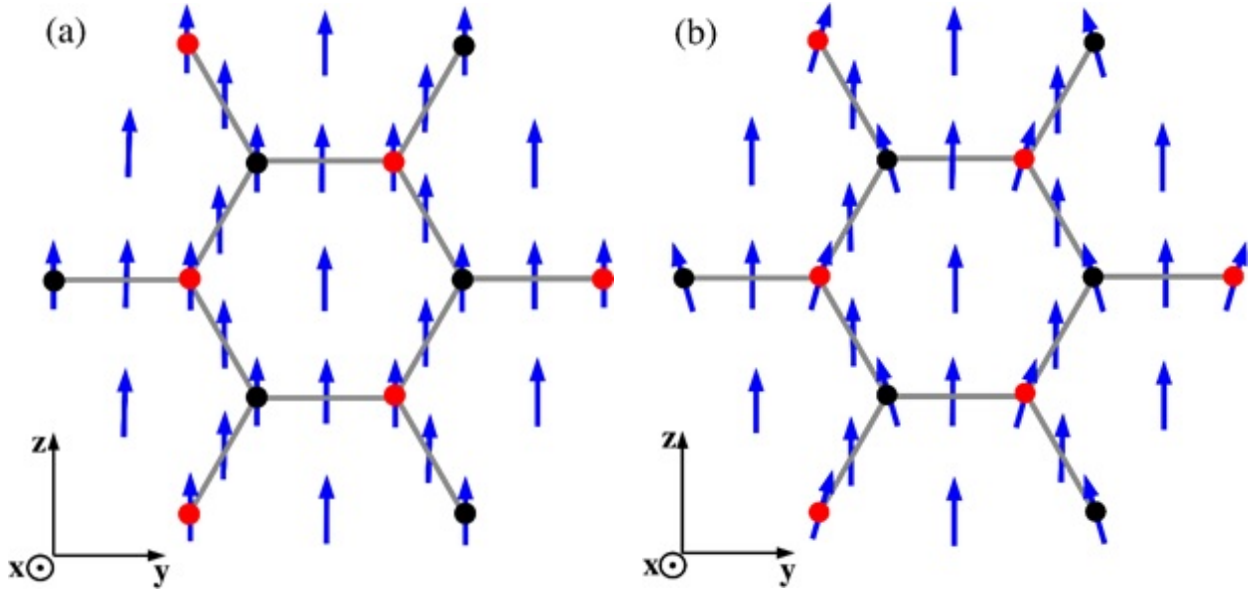


Рисунок 1 – Схематическое изображение образца графена на ферромагнитной подложке. Ориентация осей показана в левом нижнем углу. Начало координат находится в центре правильного шестиугольника. Атомы углерода графена представлены черными (подрешетка В) и красными (подрешетка А) кругами. Сплошные (серые) линии, соединяющие атомы, показывают углерод-углеродные химические связи. Под графеном находится ферромагнитная подложка. Синие стрелки представляют локальную намагниченность на поверхности ферромагнетика. Панель (а) соответствует случаю идеальной намагниченности, см. уравнение (11). Панель (b) представляет состояние с подкосом. В этом случае проекция намагниченности M_y периодически изменяется в пространстве, см. уравнения (16) и (17). Мы рассматриваем только те деформации подкоса, для которых M_y имеет противоположные знаки под атомами, принадлежащими разным подрешеткам, в соответствии с условием (17). Легко заметить на панели (b), что $M_y > 0$ под атомами подрешетки А, и $M_y < 0$ для подрешетки В

Взаимодействие между электронами описывается с помощью гамильтониана Хаббарда:

$$\hat{H}_{\text{HB}} = U \sum_{\mathbf{R}_\alpha} \hat{n}_{\mathbf{R}_\alpha \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{R}_\alpha \downarrow}, \quad (6)$$

где

$$\hat{n}_{\mathbf{R}_\alpha \sigma} = \hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \sigma} \quad (7)$$

- оператор числа электронов на p_z -орбитали, а $\alpha = A, B$ - индекс подрешетки. Наконец, зеемановский член $\hat{H}_Z$, индуцированный близости к магнитной подложке, равен:

$$\hat{H}_Z = \sum_{\mathbf{R}_\alpha} \mathbf{h}_{\mathbf{R}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{R}_\alpha}. \quad (8)$$

В этой формуле оператор спина электрона $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{R}_\alpha}$ определяется известным выражением:

$$\hat{S}_{\mathbf{R}_\alpha}^j = \left(\hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \uparrow}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \downarrow}^\dagger \right) \hat{\sigma}^j \begin{pmatrix} \hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \uparrow} \\ \hat{d}_{\mathbf{R}_\alpha \downarrow} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\hat{\sigma}^j$ — соответствующие матрицы Паули. Величина $\mathbf{h}_{\mathbf{R}_\alpha}$ в $\hat{H}_Z$ суть обменное поле, испытываемое электронами на подрешетке α , на элементарной ячейке $\mathbf{R}$. Далее мы будем предполагать, что $\mathbf{h}_{\mathbf{R}_\alpha}$ прямо пропорциональна локальной намагниченности подложки $\mathbf{M}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{h}_{\mathbf{R}_\alpha} = \tau \mathbf{M}(0, \mathbf{R}_\alpha). \quad (10)$$

В этом соотношении коэффициент τ отражает силу магнитного эффекта близости. Уравнение (10) подразумевает, что зеемановское поле на определенном атоме углерода пропорционально намагниченности подложки непосредственно под этим атомом. Также мы отметим, что наша модель не учитывает спин-орбитальное взаимодействие (данный вопрос мы кратко обсудим в разделе VI).

В случае, когда взаимодействия нет (т.е. $U = 0$) и намагниченность однородна:

$$\mathbf{M} = M(0, 0, 1), \quad M > 0, \quad (11)$$

гамильтониан $\hat{H}$ принимает вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}, \quad (12)$$

где $\hat{\Phi}_{\mathbf{q}} = (\hat{d}_{\mathbf{q}A\uparrow}, \hat{d}_{\mathbf{q}B\uparrow}, \hat{d}_{\mathbf{q}A\downarrow}, \hat{d}_{\mathbf{q}B\downarrow})^T$ — биспинорный оператор, соответствующий состояниям с квазиимпульсом $\mathbf{q}$. В этом выражении $\hat{d}_{\mathbf{q}\alpha\sigma}$ — оператор уничтожения электрона, расположенного на подрешетке α , с квазиимпульсом $\mathbf{q}$ и спином $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Матрица $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$ имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} h & -tf_{\mathbf{q}} & 0 & 0 \\ -tf_{\mathbf{q}}^* & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & 0 & -tf_{\mathbf{q}}^* & -h \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где локальное зеемановское поле h равняется $h = \tau M$, а функция $f_{\mathbf{q}}$ выражается следующим образом:

$$f_{\mathbf{q}} = \left[1 + 2 \exp\left(\frac{3ia_0q_y}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a_0q_z}{2}\right) \right]. \quad (14)$$

Диагонализуя гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$, мы получим спектр электронов графена на ферромагнитной подложке:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(1,2,3,4)} = \pm h \pm t|f_{\mathbf{q}}|. \quad (15)$$

Это выражение показывает, что при наличии магнитной подложки электронная структура состоит из четырех невырожденных зон. Две из них пересекают уровень Ферми, образуя круговую поверхность Ферми вокруг каждой точки Дирака. Соответствующая дисперсия показана на рис. 2.

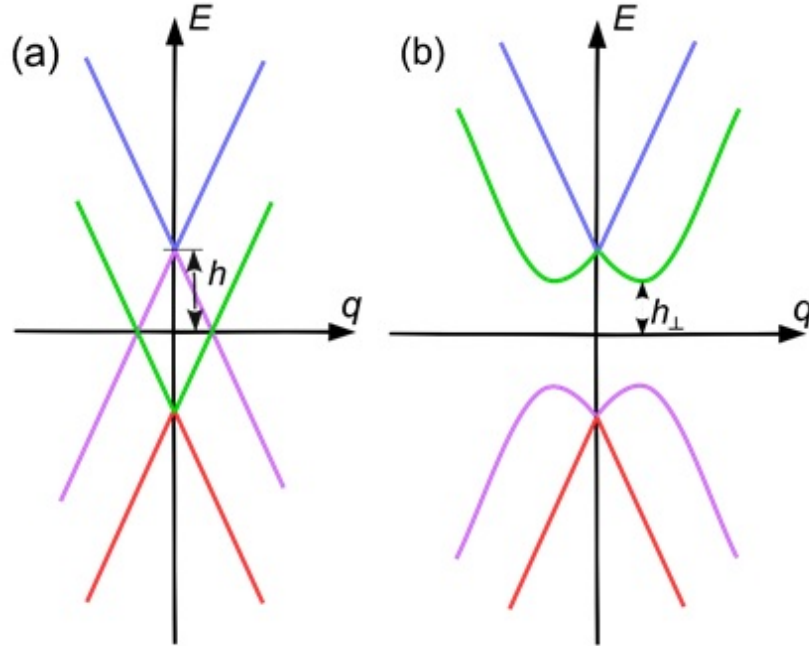


Рисунок 2 – Схематическое изображение электронной дисперсии для графена на ферромагнитной подложке. Горизонтальная ось соответствует абсолютной величине волнового вектора. Вертикальная ось соответствует энергии. Начало координат соответствует точке Дирака (спектры вблизи обеих точек Дирака идентичны). Для электронных состояний со спином $\sigma = \uparrow$ ($\sigma = \downarrow$) вершина конуса Дирака смещена на h (смещена на $-h$). Дисперсия для идеально однородной намагниченности представлена на панели (а). Зона, показанная синей (красной) линией, полностью пуста (заполнена). Лиловая и зеленая линии соответствуют зонам, пересекающим уровень Ферми. Эти зоны образуют электронную и дырочную поверхности Ферми. На панели (а) электронная и дырочная поверхности Ферми совпадают, демонстрируя идеальный нестинг. Диэлектрическое состояние с подкосом намагниченности представлено на панели (b). Заполненные зоны (красная и лиловая кривые) образованы смешанными состояниями, полученными в результате гибридизации электронных и дырочных состояний. Пустые зоны показаны зеленым и синим цветом. Спектр имеет щель $2h_{\perp}$.

Стоит обратить внимание на то, что поверхность Ферми формируется без внешнего легирования. Другими словами, наличие зеемановского поля приводит к эффекту самолегирования: электроны покидают зону $\sigma = \uparrow$, скапливаясь вместо этого в зоне $\sigma = \downarrow$, образуя две совпадающие поверхности Ферми. Благодаря этому спин-зависимому механизму возникающие поверхности Ферми не являются вырожденными по спину, в отличие от ситуации в обычном металле.

Также отметим, что включение отталкивающего взаимодействия $U > 0$ в модель вносит несколько изменений в невзаимодействующие электронные состояния, описанные в предыдущих параграфах. Во-первых, конечное электрон-электронное взаимодействие перенормирует зеемановскую восприимчивость (это слабый эффект, как мы увидим ниже). Но, что еще важнее, взаимодействие может вызвать переход в фазу волны спиновой плотности [10]. Наш расчёт покажет, что при низкой температуре две зарождающиеся неустойчивости, связанные с магнитно-электронными эффектами и с наличием волны спиновой плотности, взаимодействуют и взаимно усиливают друг друга.

IV. Магнитно-электронная неустойчивость

Для большей ясности кратко опишем происхождение магнитно-электронной неустойчивости в модели невзаимодействующих электронов, т.е. при $U = 0$ (более подробную информацию можно найти в нашей работе [9]).

Представим, что идеальный ферромагнитный порядок в подложке [описываемый выражением (11)] нарушен слабой деформацией подкоса вдоль оси Oy :

$$\mathbf{M} = M(0, m, 1 + O(m^2)), \quad (16)$$

где $m = m(\mathbf{r}) = m(x, \mathbf{R})$, $|m| \ll 1$, задает отклонение вектора намагниченности от оси Oz .

Подкос намагниченности увеличивает магнитную энергию подложки E_m . Можно ожидать, что слабая деформация m приводит к квадратичной поправке к магнитной энергии: $\delta E_m = O(m^2)$, $\delta E_m > 0$. Из-за ненулевого m электроны графена испытывают воздействие неоднородного зеемановского поля. Пока $h = \tau M m$ мало, можно использовать теорию возмущений второго порядка для оценки поправки к энергии электронов графена δE_e , вызванной наличием m . Как это всегда бывает для поправок второго порядка, δE_e отрицательна ($\delta E_e \leq 0$), но в пределе малых τ и M полная энергия увеличивается ($\delta E_m + \delta E_e > 0$), что подразумевает общую устойчивость однородной ферромагнитной конфигурации и соответствующей зонной структуры.

Тем не менее, существует особый тип подкоса m , для которого этот механизм устойчивости не работает. Мы объяснили в [9], что из-за существования нестинга поверхностей Ферми в нашей гетероструктуре можно построить $m = m(\mathbf{r})$ таким образом, что соответствующая поправка δE_e больше не будет описываться теорией возмущений второго порядка. Более того, δE_e будет неаналитичной по m , и при этом общая поправка $\delta E_m + \delta E_e$ может стать отрицательной при подходящем выборе параметров. Так обнаруживается магнитно-электронная неустойчивость.

Чтобы конкретизировать наши рассуждения, зададим m таким образом, что $m = m_\perp > 0$ под атомами углерода, принадлежащими подрешетке A , и $m = -m_\perp < 0$ под атомами подрешетки B . Другими словами,

$$m(0, \mathbf{R}_A) = -m(0, \mathbf{R}_B) = m_\perp. \quad (17)$$

Схематически состояние с такой деформацией подкоса показано на рис. 1(b). При большом отдалении от поверхности вглубь подложки однородная намагниченность восстанавливается: то есть $m(x, \mathbf{R}) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$.

Формально говоря, деформация подкоса, удовлетворяющая уравнению (17), вызывает гибридизацию между электронами и дырками на уровне Ферми. Такая гибридизация приводит к открытию щели и образованию неаналитических поправок. Наши вычисления в этом разделе явно докажут этот факт. Что касается более общего, основанного на симметрии, обсуждения этого вопроса, заинтересованные читатели могут обратиться к работам [10] и [11].

При деформации подкоса (17) оценка для поправки к магнитной энергии есть $\delta E_m \sim JM^2 m_\perp^2 \mathcal{N}_g$, где $\mathcal{N}_g$ - число элементарных ячеек в образце графена, а J - обменный интеграл. Для конкретной модели ферромагнитной подложки мы получили следующий результат (см. Приложение А):

$$\delta \mathcal{E}_m = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\zeta_\perp^2 T_C}{\zeta_0^2 t}, \quad (18)$$

где $\delta \mathcal{E}_m = \delta E_m / (\mathcal{N}_g t)$ - магнитная энергия, нормированная на элементарную ячейку, а ζ_0 и $\zeta_\perp$ безраз-

мерные зеемановские поля:

$$\zeta_0 = \frac{h}{t}, \quad \zeta_{\perp} = \frac{h_{\perp}}{t}. \quad (19)$$

Для расчета энергии электронов нам необходимо найти зонную структуру при наличии подкоса (17). Поскольку в этом разделе мы пренебрегаем электрон-электронным взаимодействием ($U = 0$), то гамильтониан для электронов графена может быть выражен как в уравнении (12), при этом матрица $\mathcal{H}_{\mathbf{q}}$ примет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} h & -tf_{\mathbf{q}} & -ih_{\perp} & 0 \\ -tf_{\mathbf{q}}^* & h & 0 & ih_{\perp} \\ ih_{\perp} & 0 & -h & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & -ih_{\perp} & -tf_{\mathbf{q}}^* & -h \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где

$$h_{\perp} = \tau M m_{\perp}. \quad (21)$$

Стоит отметить, что $h_{\perp}$ сохраняет трансляционную симметрию гексагональной решетки, но нарушает симметрию между двумя подрешетками.

Диагонализуя $\mathcal{H}_{\mathbf{q}}$, находим дисперсию электронов при наличии деформации подкоса (17):

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(1,2,3,4)} = \pm \sqrt{h_{\perp}^2 + (h \pm t|f_{\mathbf{q}}|)^2}. \quad (22)$$

Данный спектр схематически представлен на рис. 2(b). Общая электронная энергия графена может быть выражена как $E_e = t\mathcal{N}_g \mathcal{E}_e$, где полная безразмерная энергия $\mathcal{E}_e$ представляет собой сумму двух вкладов от двух зон $\mathcal{E}_e = \mathcal{E}_+ + \mathcal{E}_-$, где:

$$\mathcal{E}_{\pm} = - \int_0^3 d\zeta \rho(\zeta) \sqrt{\zeta_{\perp}^2 + (\zeta_0 \pm \zeta)^2}. \quad (23)$$

В этом уравнении безразмерная плотность состояний выражается формулой:

$$\rho(\zeta) = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{V_{\text{BZ}}} \delta(\zeta - |f_{\mathbf{k}}|). \quad (24)$$

Для малых $|\zeta|$ можем получить приближенное равенство:

$$\rho(\zeta) = \frac{2|\zeta|}{\sqrt{3}\pi} + \frac{2|\zeta|^3}{3\pi} + \dots, \quad (25)$$

которое является обобщением известного выражения для линейной плотности состояний графена вблизи энергии Дирака.

Анализ выражения для $\mathcal{E}_-$ показывает, что при малых $m_{\perp}$ верно следующее разложение:

$$\mathcal{E}_-(\zeta_{\perp}) \approx \mathcal{E}_-(0) + 2\rho(\zeta_0)\zeta_{\perp}^2 \ln \zeta_{\perp} + \dots, \quad (26)$$

где многоточие обозначает менее сингулярные члены. Мы видим, что из-за члена $m_{\perp}^2 \ln m_{\perp}$ полная энергия гетероструктуры всегда уменьшается, когда $m_{\perp}$ отлично от нуля, что указывает на нестабильность однородного ферромагнитного состояния.

Равновесное значение $m_{\perp}$ можно найти из условия минимизации полной энергии:

$$\frac{\partial}{\partial \zeta_{\perp}} (\mathcal{E}_e + \delta \mathcal{E}_m) = 0. \quad (27)$$

Решение соответствующей задачи изложено в Приложении Б, где мы выводим следующее выражение для безразмерного поля $\zeta_{\perp}$:

$$\zeta_{\perp} = \sqrt{12\zeta_0} \exp \left[\frac{\sqrt{3}\pi}{4\zeta_0} \left(\eta(\zeta_0) - \frac{2\pi T_C}{3\sqrt{3}\zeta_0^2 t} \right) \right]. \quad (28)$$

Функция $\eta(\zeta_0)$ в этом выражении определяется как:

$$\eta(\zeta_0) = \int_0^3 \frac{[\rho(\zeta) - \rho(\zeta_0)] d\zeta}{\zeta - \zeta_0} + \int_0^3 \frac{\rho(\zeta) d\zeta}{\zeta + \zeta_0}. \quad (29)$$

При малых ζ_0 можно показать (см. Приложение В), что:

$$\eta(\zeta_0) \approx 2I - \frac{2\zeta_0}{\sqrt{3}\pi} \ln\left(\frac{3}{\zeta_0}\right), \quad (30)$$

где постоянная $I \approx 0.89$ рассчитана численно. Используя это приближение, можем упростить выражение (28):

$$\zeta_{\perp} = 2\zeta_0 \exp\left(\frac{C}{\zeta_0} - \frac{\pi^2 T_C}{6\zeta_0^3 t}\right). \quad (31)$$

Коэффициент C в этой формуле примерно равен 2.42. Параметр порядка в таком случае равен:

$$h_{\perp} = t\zeta_{\perp} = 2h \exp\left(\frac{Ct}{h} - \frac{\pi^2 T_C t^2}{6h^3}\right), \quad (32)$$

в то время как спектральная щель равна $2h_{\perp}$. Это соотношение для щели можно сравнить с уравнением (45) из работы [9]. Мы видим, что, хотя общая структура этих двух выражений почти идентична, значение щели, которое мы вывели в этом разделе, всегда превышает значение, найденное в работе [9]. Это является следствием более точного учёта вклада одноэлектронных состояний с более высокой энергией.

IV. Учет электрон-электронного взаимодействия

В этом разделе мы обсудим, как электрон-электронное взаимодействие влияет на магнитно-электронную неустойчивость. В частности, мы получим аналог уравнения (32), учитывающий наличие в модели $U > 0$. Для этого мы применим приближение среднего поля. Существует несколько эквивалентных способов построения теории среднего поля. Ниже мы будем использовать вариационную версию этой теории. Для этого мы вводим гамильтониан среднего поля $\hat{H}^{\text{MF}}$:

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}^{\text{MF}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}, \quad (33)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}^{\text{MF}} = t \begin{pmatrix} \tilde{\zeta}_0 & -f_{\mathbf{q}} & -i\tilde{\zeta}_{\perp} & 0 \\ -f_{\mathbf{q}}^* & \tilde{\zeta}_0 & 0 & i\tilde{\zeta}_{\perp} \\ i\tilde{\zeta}_{\perp} & 0 & -\tilde{\zeta}_0 & -f_{\mathbf{q}} \\ 0 & -i\tilde{\zeta}_{\perp} & -f_{\mathbf{q}}^* & -\tilde{\zeta}_0 \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Основное состояние $|\Psi_{\text{MF}}\rangle$ гамильтониана $\hat{H}^{\text{MF}}$ будет выполнять роль нашей вариационной волновой функции. Безразмерные величины $\tilde{\zeta}_0$ и $\tilde{\zeta}_{\perp}$ будут служить параметрами оптимизации для нашего вариационного метода. Матрица $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}^{\text{MF}}$ имеет ту же структуру, что и матрица $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$ в уравнении (20). Другими словами, мы предполагаем, что взаимодействие перенормирует параметры $\tilde{\zeta}_0$ и $\tilde{\zeta}_{\perp}$, отвечающие за магнитно-электронную неустойчивость. Как мы увидим ниже, эта перенормировка усилит неустойчивость.

Используя символ $\langle \dots \rangle$ для обозначения усреднения по основному состоянию $|\Psi_{\text{MF}}\rangle$, мы можем выразить полную безразмерную вариационную энергию таким образом:

$$\mathcal{E}^{\text{var}} = (\mathcal{N}_{gt})^{-1} \langle \hat{H} \rangle + \delta\mathcal{E}_{\text{m}}. \quad (35)$$

Подобрав нужные значения $\zeta_{\perp}$, $\tilde{\zeta}_0$ и $\tilde{\zeta}_{\perp}$, мы минимизируем вариационную энергию $\mathcal{E}^{\text{var}}$. Дифференцируя $\mathcal{E}^{\text{var}}$ по $\tilde{\zeta}_{\perp}$, получим:

$$2t \left(\zeta_{\perp} - \tilde{\zeta}_{\perp} \right) - U \langle S^y \rangle = 0, \quad (36)$$

где $\langle S^y \rangle$ - средняя проекция намагниченности на узле, принадлежащем подрешетке A , то есть $\langle S_{\mathbf{R}_A}^y \rangle = \langle S^y \rangle$. Используя теорему Гельмана-Фейнмана (см. Приложение Г), получим:

$$\langle S^y \rangle = -\frac{\tilde{\zeta}_{\perp}}{2} \left[\eta(\zeta_0) + \frac{2\tilde{\zeta}_0}{\sqrt{3}\pi} \ln\left(\frac{12\tilde{\zeta}_0}{\tilde{\zeta}_{\perp}^2}\right) \right]. \quad (37)$$

Обратите внимание, что $\langle S_{\mathbf{R}_B}^y \rangle = -\langle S^y \rangle$. Другими словами, усредненные проекции намагниченности на ось Oy имеют разные знаки на разных подрешетках. Дифференцирование по $\tilde{\zeta}_0$ позволяет получить второе уравнение среднего поля:

$$2t \left(\zeta_0 - \tilde{\zeta}_0 \right) - U \langle S^z \rangle = 0. \quad (38)$$

Как и выше, для вычисления $\langle S^z \rangle$ можно воспользоваться теоремой Гельмана-Фейнмана и установить, что:

$$\langle S^z \rangle \approx -\frac{\sqrt{3}}{\pi} \tilde{\zeta}_0^2. \quad (39)$$

Выводя это соотношение, мы использовали уравнение (25), справедливое для малых $\tilde{\zeta}_0$. Поскольку $\langle S^z \rangle = O(\tilde{\zeta}_0^2)$, последний член в уравнении (38) пренебрежимо мал, и мы можем заключить, что:

$$\tilde{\zeta}_0 \approx \zeta_0. \quad (40)$$

Последняя формула подразумевает, что электрон-электронное взаимодействие не вносит значительный вклад в перенормировку зеемановского поля, индуцированного подложкой.

Наконец, минимизируя $\mathcal{E}^{\text{var}}$ по $\zeta_{\perp}$, мы выведем:

$$\frac{\partial \mathcal{E}^{\text{var}}}{\partial \zeta_{\perp}} = 2\langle S^y \rangle + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \frac{T_C}{t\zeta_0^2} \zeta_{\perp} = 0. \quad (41)$$

Собирая уравнения (36), (37) и (41), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \zeta_{\perp} - \tilde{\zeta}_{\perp} = \frac{U}{2t} \langle S^y \rangle, \\ -2\langle S^y \rangle = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \frac{T_C}{t\zeta_0^2} \zeta_{\perp}, \\ -2\langle S^y \rangle = \tilde{\zeta}_{\perp} \left(\eta(\zeta_0) + \frac{2\zeta_0}{\sqrt{3}\pi} \ln \left| \frac{12\zeta_0}{\tilde{\zeta}_{\perp}^2} \right| \right), \end{cases} \quad (42)$$

где последнее уравнение можно упростить с помощью равенства (30). Решая эту систему, определяем $\tilde{\zeta}_{\perp}$ и находим параметр порядка $h_{\perp} = t\tilde{\zeta}_{\perp}$:

$$h_{\perp} = 2h \exp \left(\frac{Ct}{h} - \frac{\sqrt{3}\pi^2 T_C t^2}{6\sqrt{3}h^3 + \pi U T_C h} \right). \quad (43)$$

Это выражение совпадает с уравнением (28) в пределе нулевого U , как и должно быть. Когда U растет, величина подкоса $h_{\perp}$ тоже увеличивается. Зависимости $h_{\perp}$ от U показаны на рис. 3 для различных вариантов выбора параметров.

V. Обсуждение

В предыдущих разделах мы показали, что графен на ферромагнитной подложке демонстрирует многочастичную магнитно-электронную неустойчивость. Вблизи раздела между подложкой и графеном указанная неустойчивость порождает конечный подкос у вектора ферромагнитной поляризации. Подкос, в свою очередь, приводит к образованию щели в электронном спектре графена. Наш анализ обобщает исследование работы [9], учитывая эффекты конечного электрон-электронного взаимодействия. Из уравнения (43) видно, что электрон-электронное взаимодействие действительно усиливает неустойчивость.

Неустойчивость может быть потенциально обнаружена в эксперименте, измеряющем температурную зависимость проводимости графена $\sigma = \sigma(T)$. Неустойчивость проявится в резком уменьшении $\sigma(T)$, когда T опустится ниже характерного масштаба энергии $\sim h_{\perp}$. Это означает, что для того, чтобы неустойчивость можно было наблюдать в эксперименте, значение $h_{\perp}$ должно быть достаточно большим. Для оценки $h_{\perp}$ можно проанализировать рис. 3, на котором построены графики $h_{\perp}$ в зависимости от U для различных значений T_C .

Графики на рис. 3 показывают, что, хотя при $U = 0$ параметр порядка может быть очень слабым, реалистичное электрон-электронное взаимодействие резко, на порядки величины, увеличивает равновесное значение $h_{\perp}$, делая его достаточно сильным, чтобы его можно было обнаружить в эксперименте. В частности, для гетероструктуры, состоящей из графена располагающегося на подложке из сульфида европия EuS, описанной в работе [2], температура Кюри и обменное поле соответственно равны $T_C = 16$ К и $h = 300$ Тл (эквивалентно $h = 20$ мэВ). Для таких параметров $h_{\perp} \gtrsim 10$ мэВ при $U \gtrsim 4.65$ эВ.

Принимая во внимание уравнение (43) для $h_{\perp}$, мы видим, что, в зависимости от параметра U , система может находиться в двух разных режимах. Чтобы проиллюстрировать это, перепишем уравнение (43) следующим образом:

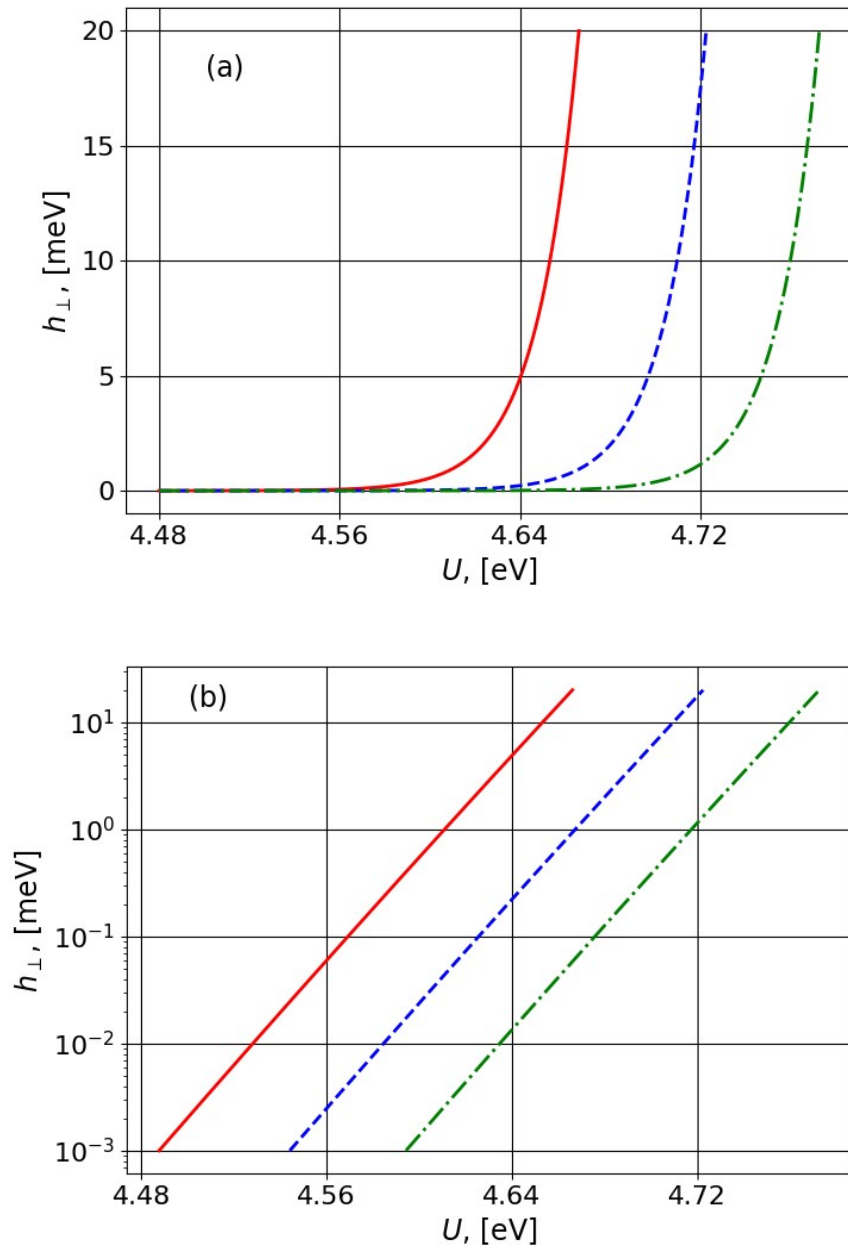


Рисунок 3 – Параметр порядка $h_{\perp}$ как функция параметра взаимодействия U для различных T_C в линейном (a) и логарифмическом (b) масштабе. Сплошная (красная) кривая для $T_C = 16$ K, пунктирная (синяя) кривая для $T_C = 17$ K, штрихпунктирная (зеленая) кривая для $T_C = 18$ K. Для этих кривых мы используем $h = 20$ мэВ (или, что эквивалентно, $h = 300$ Тл)

$$h_{\perp} = 2h \exp \left(\frac{Ct}{h} - \frac{\sqrt{3}\pi t^2/h}{U_* + U} \right), \quad (44)$$

где параметр U_* описывается выражением:

$$U_* = \frac{6\sqrt{3}h^2}{\pi T_C}. \quad (45)$$

Видно, что, когда $U \ll U_*$, мы можем пренебречь U в уравнении (43). В этом пределе эффекты межэлектронного взаимодействия слабы, и неустойчивость обусловлена исключительно взаимодействием между магнитной подсистемой подложки и электронами графена. Этот режим изучен в работе [9].

В противном случае ($U \gg U_*$) можно рассматривать U_* как малую поправку к U , которой можно пренебречь в простейшем приближении. Если U_* удалить из уравнения (44), то T_C больше не будет входить в выражение для $h_{\perp}$, указывая на то, что связь между появлением подкоса и нестингом поверхностей Ферми больше не принципиальна. Вместо этого единственной функцией ферромагнитной подложки является генерация поверхности Ферми с конечной плотностью состояний $\rho \propto h$ на уровне Ферми. В этом режиме наша система переходит в диэлектрическое состояние волны спиновой плотности, стабилизированное межэлектронным взаимодействием.

Два режима разделены кроссовером, который происходит при $U \sim U_*$. В области кроссовера совместное влияние электрон-электронного взаимодействия и подкоса намагниченности в подложке усиливает неустойчивость.

Наш модельный гамильтониан (4) не учитывает спин-орбитальное взаимодействие, возникающее в графене при контакте с магнитной подложкой. Мы используем это упрощение по двум причинам. Во-первых, мы хотим обратить внимание на теоретическую работу [13], исследовавшую систему, родственную нашей (двухслойный графен на ферромагнитной подложке). Хотя модель в [13] пренебрегала спин-орбитальным взаимодействием, она успешно объяснила данные моделирования [8], выполненные по методу функционала плотности. Это указывает на допустимость подобного упрощающего подхода. Во-вторых, ответ на вопрос о роли и описании спин-орбитальных эффектов в изучаемой нами системе, скорее всего, весьма неуниверсален и зависит от специфических особенностей конкретной экспериментальной ситуации. Об этом, в частности, говорит теоретический анализ, выполненный в работе [14]. Поэтому нам представляется оправданным, что на начальном этапе исследований спин-орбитальными эффектами можно пренебречь.

В заключение ещё раз отметим, что мы изучили влияние электрон-электронного взаимодействия на магнитно-электронную неустойчивость в графене на ферромагнитной подложке. Мы продемонстрировали, что электрон-электронное взаимодействие значительно усиливает неустойчивость: даже умеренное по силе взаимодействие может увеличить характерный масштаб энергии на несколько порядков. Наши результаты показывают, что неустойчивость можно обнаружить экспериментально в реалистичных условиях.

Приложение А. Поправка к магнитной энергии

В этом приложении мы вычислим магнитную энергию подложки с подкосом ферромагнитной намагниченности и без нее. В наших выкладках мы будем опираться на теорию Вейса для ферромагнетиков. В приближении Вейса магнитная энергия подложки равняется:

$$E_m = -\frac{J}{2} \sum_{i\delta} \mathbf{M}_{\mathbf{r}_i} \mathbf{M}_{\mathbf{r}_i+\delta}. \quad (A1)$$

Здесь J — обменный интеграл, $\mathbf{r}_i$ обозначает положение i -го атома в трехмерной решетке подложки, векторы δ соединяют данный атом с его ближайшими соседями, а $\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}$ — намагниченность на i -том атоме. Мы предполагаем, что векторы $\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}$ имеют одинаковую длину: $|\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}| = M$ для любого узла решетки i .

Для модели такого типа можно вывести выражение для температуры Кюри:

$$T_C = \frac{JM^2Z}{3}, \quad (A2)$$

где Z — число ближайших соседей атома. Это выражение можно получить, используя метод среднего поля, примененный к энергии (A1). Преимущество уравнения (A2) заключается в том, что оно позволяет

нам оценить J , используя экспериментальные данные для температуры Кюри, низкотемпературной намагниченности подложки M и Z .

Обозначая число атомов в подложке как $\mathcal{N}$, можно выразить энергию идеально упорядоченной ферромагнитной конфигурации как:

$$E_{\parallel} = -\frac{\mathcal{N}}{2} Z J M^2, \quad (\text{A3})$$

что справедливо при $T \ll T_C$. Для конфигураций со слабыми и плавными отклонениями от однородно упорядоченного состояния энергия становится $E_m \approx E_{\parallel} + \delta E_m$, где поправка δE_m равняется:

$$\delta E_m \approx \frac{J M^2}{2a_0} \int_V (\nabla m)^2 dV, \quad (\text{A4})$$

где мы предположили, что материал подложки имеет кубическую решетку ($Z = 6$), постоянная решетки которой равна a_0 . Безразмерная величина подкоса $m = m(\mathbf{r})$, $|m| \ll 1$ вводится уравнением (16). Здесь она рассматривается как функция трехмерной непрерывной переменной $\mathbf{r} = (x, \mathbf{R})$, тогда как интегрирование в уравнении (A4) выполняется по объему подложки ($x < 0$).

Теперь мы хотим, используя уравнение (A4), оценить увеличение магнитной энергии δE_m , вызванное подкосом (см. рис. 1(b)). Наша цель — (i) найти такое $m(\mathbf{r})$, удовлетворяющее граничному условию (17) при $x = 0$, которое (ii) обеспечивало минимальность функционала (A4).

Однако граничное условие (17) было сформулировано для решеточной функции. Для непрерывного приближения, которое мы используем в этом Приложении, такое граничное условие является неполным. Действительно, оно фиксирует значения m только на дискретном наборе точек, таким образом, на $\mathbb{R}^2$ существует бесконечно много нетождественных функций, удовлетворяющих уравнению (17). Чтобы решить эту проблему, мы расширим граничное условие:

$$m(0, \mathbf{R}) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} m_{\perp} \sum_{\mathbf{K}} \sin(\mathbf{K}\mathbf{R}), \quad \mathbf{R} \in \mathbb{R}^2. \quad (\text{A5})$$

где вектор $\mathbf{K}$ пробегает следующий список значений:

$$\mathbf{K} = \mathbf{b}_1, \quad \mathbf{K} = \mathbf{b}_2, \quad \mathbf{K} = -\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2. \quad (\text{A6})$$

Удобство уравнения (A5) в том, что оно не только удовлетворяет уравнению (17), но и содержит минимальное число (шесть) плоских волн, в то время как все пространственные частоты $|\mathbf{K}| = 4\pi/(3a_0)$ имеют наименьшее возможное значение, совместимое с условием (17). Учет плоских волн с более короткими длинами волн приводит к большим вкладам в функционал δE_m .

Используя положения (i) и (ii), сформулированные выше, запишем уравнение Лапласа:

$$\nabla^2 m = 0, \quad (\text{A7})$$

для m внутри подложки. На границе раздела должно выполняться граничное условие (A5). Решение этой математической задачи имеет вид:

$$m(\mathbf{r}) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} m_{\perp} \exp(|\mathbf{K}|x) \sum_{\mathbf{K}} \sin(\mathbf{K}\mathbf{R}). \quad (\text{A8})$$

Это выражение показывает, что, как и ожидалось, подкос намагниченности наиболее выражен непосредственно на поверхности ($x = 0$), но он быстро уменьшается в глубину подложки. Подставляя это $m = m(\mathbf{r})$ в уравнение (A4), получим:

$$\delta E_m = \frac{4\pi}{27} \frac{J m_{\perp}^2 M^2 \mathcal{S}}{a_0^2} = \frac{4\pi}{27} \frac{J h_{\perp}^2 \mathcal{S}}{a_0^2 \tau^2}. \quad (\text{A9})$$

Мы можем записать это выражение, используя безразмерные величины:

$$\delta \mathcal{E}_m = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\zeta_{\perp}^2 T_C}{\zeta_0^2 t}. \quad (\text{A10})$$

Как мы уже упоминали в разделе IV, магнитная энергия, связанная с наличием подкоса намагниченности, квадратична по $m_{\perp}$ и не содержит никаких неаналитических вкладов.

Приложение Б. Величина щели в одноэлектронном спектре

В этом приложении мы приводим подробный вывод уравнения (28) для безразмерного параметра порядка $\zeta_{\perp}$. Вычисления, представленные ниже, совершенствуют способ получения уравнения (30) в работе [12]. Нашей отправной точкой является уравнение (27), которое мы перепишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \delta\mathcal{E}_m)}{\partial\zeta_{\perp}} &= \zeta_{\perp} \left(-\int_0^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\sqrt{\zeta_{\perp}^2 + (\zeta - \zeta_0)^2}} - \int_0^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\sqrt{\zeta_{\perp}^2 + (\zeta + \zeta_0)^2}} + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \frac{T_C}{\zeta_0^2 t} \right) \approx \\ &\approx \zeta_{\perp} \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \frac{T_C}{\zeta_0^2 t} - \rho(\zeta_0) \int_0^3 \frac{d\zeta}{\sqrt{\zeta_{\perp}^2 + (\zeta - \zeta_0)^2}} - \eta(\zeta_0) \right) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

где функция $\eta(\zeta_0)$ определяется уравнением (29). Последний интеграл в (B1) можно найти явно:

$$\rho(\zeta_0) \int_0^3 \frac{d\zeta}{\sqrt{\zeta_{\perp}^2 + (\zeta - \zeta_0)^2}} \approx \frac{2\zeta_0}{\sqrt{3}\pi} \ln \left(\frac{12\zeta_0}{\zeta_{\perp}^2} \right). \quad (\text{B2})$$

В результате мы можем решить уравнение (B1) и получить значение $\zeta_{\perp}$:

$$\zeta_{\perp} = \sqrt{12\zeta_0} \exp \left\{ \frac{\sqrt{3}\pi}{4\zeta_0} \left(\eta(\zeta_0) - \frac{2\pi T_C}{3\sqrt{3}\zeta_0^2 t} \right) \right\}, \quad (\text{B3})$$

которое полностью соответствует уравнению (28).

Приложение В. Приближение для функции $\eta(\zeta_0)$

В этом приложении мы выводим приближенное выражение для $\eta(\zeta_0)$, действительное в пределе малых ζ_0 . Начнем с того, что отметим, что особенности интеграла $\int_0^3 d\zeta [\rho(\zeta) - \rho(\zeta_0)]/|\zeta - \zeta_0|$ при малых ζ_0 слабы, и достаточно аппроксимировать интеграл константой:

$$\int_0^3 \frac{[\rho(\zeta) - \rho(\zeta_0)] d\zeta}{|\zeta - \zeta_0|} = I + O(\zeta_0), \quad (\text{B1})$$

где

$$I = \int_0^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\zeta} \approx 0.89. \quad (\text{B2})$$

Чтобы доказать, что отброшенные в уравнении (B1) члены действительно являются $O(\zeta_0)$, мы разобьем интервал интегрирования на два подинтервала $\int_0^3 \dots = \int_0^{\zeta^*} \dots + \int_{\zeta^*}^3 \dots$, где ζ^* удовлетворяет неравенствам $\zeta_0 < \zeta^* \ll 1$. Можно записать:

$$\int_{\zeta^*}^3 \frac{[\rho(\zeta) - \rho(\zeta_0)] d\zeta}{|\zeta - \zeta_0|} = \int_{\zeta^*}^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\zeta} - \rho(\zeta_0) \int_{\zeta^*}^3 \frac{d\zeta}{\zeta - \zeta_0} + \zeta_0 \int_{\zeta^*}^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\zeta(\zeta - \zeta_0)}. \quad (\text{B3})$$

В правой части этого соотношения подынтегральные функции не имеют особенностей при $\zeta^* < \zeta < 3$. Первый интеграл не зависит от ζ_0 , тогда как два других явно принадлежат классу $O(\zeta_0)$. Что касается интеграла от 0 до ζ^* , то ввиду малости ζ^* можно воспользоваться разложением (25). Таким образом:

$$\frac{\rho(\zeta) - \rho(\zeta_0)}{\zeta - \zeta_0} \approx \frac{2}{\sqrt{3}\pi} + \frac{2\sqrt{\zeta}}{3\pi} + \frac{2\zeta_0}{3\pi(\sqrt{\zeta_0} + \sqrt{\zeta})}. \quad (\text{B4})$$

При выводе этого соотношения мы использовали следующее равенство: $\frac{x^{3/2} - y^{3/2}}{x - y} = \frac{x + \sqrt{xy} + y}{x^{1/2} + y^{1/2}}$. Из уравнения (B4) видно, что интеграл по интервалу $(0, \zeta^*)$ равен константе, не зависящей от ζ_0 плюс поправка $O(\zeta_0)$, как следует из уравнения (B1). Второй интеграл в уравнении (29) можно преобразовать следующим образом:

$$\int_0^3 \frac{\rho(\zeta)d\zeta}{\zeta + \zeta_0} = \int_0^3 \frac{\rho d\zeta}{\zeta} + \int_0^3 d\zeta \left[\frac{\rho}{\zeta_0 + \zeta} - \frac{\rho}{\zeta} \right] = I - \zeta_0 \int_0^3 \frac{\rho d\zeta}{\zeta(\zeta + \zeta_0)}. \quad (\text{B5})$$

Для оценки интеграла $\int_0^3 d\zeta \rho(\zeta)/[\zeta(\zeta + \zeta_0)]$ мы в явном виде выразим наиболее сингулярный вклад:

$$\int \frac{\rho d\zeta}{\zeta(\zeta + \zeta_0)} = \frac{2}{\sqrt{3}\pi} \ln\left(\frac{3}{\zeta_0}\right) + \int \frac{[(\rho/\zeta) - \rho'(0)] d\zeta}{\zeta + \zeta_0}. \quad (\text{B6})$$

Оставшийся интеграл конечен в пределе $\zeta_0 \rightarrow 0$, что можно доказать с помощью уравнения (25). Чтобы оценить его численно, мы разделим интервал интегрирования на две части:

$$\int_0^3 \frac{[(\rho/\zeta) - \rho'(0)] d\zeta}{\zeta + \zeta_0} = \int_0^{\zeta^*} \frac{[(\rho/\zeta) - \rho'(0)] d\zeta}{\zeta + \zeta_0} + \int_{\zeta^*}^3 \frac{[(\rho/\zeta) - \rho'(0)] d\zeta}{\zeta + \zeta_0}. \quad (\text{B7})$$

Преимущество этого представления заключается в том, что численно оцененный числитель имеет большие погрешности вблизи нуля ζ . К счастью, для малых ζ^* и $0 < \zeta < \zeta^*$ можно использовать аналитическое приближение, основанное на уравнении (25): $\rho(\zeta)/\zeta - \rho'(0) = 2\zeta^{1/2}/(3\pi)$. Интеграл по интервалу между $\zeta^* = 0.2$ и 3, оцененный численно, оказывается очень малым. Таким образом:

$$\int_0^3 \frac{[(\rho/\zeta) - \rho'(0)] d\zeta}{\zeta + \zeta_0} \approx \frac{4}{3\pi} \sqrt{\zeta^*} \approx 0.2 \quad (\text{B8})$$

для $\zeta^* = 0.2$. Собирая все члены воедино, находим:

$$\eta(\zeta_0) = 2I - \frac{2\zeta_0}{\sqrt{3}\pi} \ln\left(\frac{3}{\zeta_0}\right) + O(\zeta_0), \quad (\text{B9})$$

где сохраненные члены являются более сингулярными, чем те, которые были отброшены. Так выводится уравнение (30).

Приложение Г. Вывод уравнений среднего поля

В этом приложении мы более детально рассмотрим вывод уравнений среднего поля. Наша цель состоит в том, чтобы продифференцировать $\mathcal{E}^{\text{var}}$, определяемую уравнением (35), по вариационным параметрам $\zeta_\perp$, $\tilde{\zeta}_0$ и $\tilde{\zeta}_\perp$. Имея это в виду, выразим $\mathcal{E}^{\text{var}}$ следующим образом:

$$\mathcal{E}^{\text{var}} = (\mathcal{N}_g t)^{-1} \left(\langle \hat{H}^{\text{MF}} \rangle + \langle \delta \hat{H} \rangle + \langle \hat{H}_{\text{HB}} \rangle \right) + \delta \mathcal{E}_m. \quad (\text{Г1})$$

Это представление явно разбивает $\langle \hat{H} \rangle$ на три вклада: (i) энергия среднего поля $\langle \hat{H}^{\text{MF}} \rangle$, (ii) член, описывающий хаббардовское взаимодействие $\langle \hat{H}_{\text{HB}} \rangle$, и (iii) все прочие вклады $\langle \delta \hat{H} \rangle$. Гамильтониан в (iii) является билинейным по одноэлектронным операторам:

$$\delta \hat{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}^\dagger \delta \hat{\mathcal{H}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}, \quad (\text{Г2})$$

где матрица $\delta \hat{\mathcal{H}}$ имеет вид:

$$\delta \hat{\mathcal{H}} = t \begin{pmatrix} \delta \zeta_0 & 0 & -i\delta \zeta_\perp & 0 \\ 0 & \delta \zeta_0 & 0 & i\delta \zeta_\perp \\ i\delta \zeta_\perp & 0 & -\delta \zeta_0 & 0 \\ 0 & -i\delta \zeta_\perp & 0 & -\delta \zeta_0 \end{pmatrix}, \quad (\text{Г3})$$

где $\delta \zeta_0 = \zeta_0 - \tilde{\zeta}_0$, и $\delta \zeta_\perp = \zeta_\perp - \tilde{\zeta}_\perp$.

Продифференцируем $\mathcal{E}^{\text{var}}$ по $\tilde{\zeta}_\perp$. Член $\delta \mathcal{E}_m$ не зависит от $\tilde{\zeta}_\perp$, поэтому соответствующая производная равна нулю. Теорема Гельмана-Фейнмана позволяет установить, что:

$$\frac{\partial \langle \hat{H}^{\text{MF}} \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} = 2t \langle S^y \rangle \mathcal{N}_g. \quad (\text{Г4})$$

Здесь мы использовали соотношение $\langle S_{\mathbf{R}_A}^y \rangle = -\langle S_{\mathbf{R}_B}^y \rangle = \langle S^y \rangle$, которое связывает проекции намагниченности на подрешетках.

Чтобы вычислить производные для двух других членов в уравнении (Г1), мы можем записать для них явные выражения:

$$\langle \delta \hat{H} \rangle = 2t (\delta \zeta_0 \langle S_z \rangle + \delta \zeta_\perp \langle S_y \rangle) \mathcal{N}_g, \quad (\text{Г5})$$

$$\langle \hat{H}_{\text{HB}} \rangle = \frac{U}{2} (1 - \langle S_z \rangle^2 - \langle S_y \rangle^2) \mathcal{N}_g. \quad (\Gamma 6)$$

Таким образом:

$$\frac{\partial \langle \delta \hat{H} \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} = 2t \left(-\langle S_y \rangle + \delta \zeta_\perp \frac{\partial \langle S_y \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} \right) \mathcal{N}_g, \quad (\Gamma 7)$$

$$\frac{\partial \langle \hat{H}_{\text{HB}} \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} = -U \langle S_y \rangle \frac{\partial \langle S_y \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} \mathcal{N}_g. \quad (\Gamma 8)$$

Объединяя все вклады, получим выражение:

$$\frac{\partial \mathcal{E}^{\text{var}}}{\partial \tilde{\zeta}_\perp} = \left(2\delta \zeta_\perp - \frac{U}{t} \langle S_y \rangle \right) \frac{\partial \langle S_y \rangle}{\partial \tilde{\zeta}_\perp}. \quad (\Gamma 9)$$

Приравнивая последнее уравнение к нулю, получаем уравнение (36). Два других уравнения среднего поля выводятся аналогично. Наконец, мы хотим кратко пояснить вывод выражения (37) для $\langle S^y \rangle$. Наиболее простой подход для данной задачи — использовать уравнение (Г4). Энергия среднего поля равна:

$$\langle \hat{H}^{\text{MF}} \rangle = -\mathcal{N}_g t \int_0^3 d\zeta \rho \sqrt{\tilde{\zeta}_\perp^2 + (\tilde{\zeta}_0 - \zeta)^2} - \mathcal{N}_g t \int_0^3 d\zeta \rho \sqrt{\tilde{\zeta}_\perp^2 + (\tilde{\zeta}_0 + \zeta)^2}. \quad (\Gamma 10)$$

Подставляя это выражение в уравнение (Г4), получим:

$$2\langle S^y \rangle = -\tilde{\zeta}_\perp \int_0^3 \frac{\rho(\zeta) d\zeta}{\sqrt{\tilde{\zeta}_\perp^2 + (\tilde{\zeta}_0 - \zeta)^2}} - \tilde{\zeta}_\perp \int_0^3 \frac{\rho(\zeta) d\zeta}{\sqrt{\tilde{\zeta}_\perp^2 + (\tilde{\zeta}_0 + \zeta)^2}}. \quad (\Gamma 11)$$

Используя приёмы, обсуждаемые в Приложении Б, можно восстановить уравнение (37) из уравнения (Г11).

Список литературы

- [1] Wang Z., Tang C., Sachs R., Barlas Y., Shi J. Proximity-Induced Ferromagnetism in Graphene Revealed by the Anomalous Hall Effect // Phys. Rev. Lett. — 2015. — № 114. — P. 016603.
- [2] Wei P., Lee S., Lemaitre F., Pinel L., Cutaia D., Cha W., Katmis F., Zhu, D. Heiman Y., Hone J. Strong interfacial exchange field in the graphene/EuS heterostructure // Nat. Mater. — 2016. — №. 15. — P. 711.
- [3] Mendes J. B. S., Alves Santos O., Meireles L. M., Lacerda R. G., Vilela-Leao L. H., Machado F. L. A., Rodriguez-Suarez R. L., Azevedo A., and Rezende S. M. Spin-Current to Charge-Current Conversion and Magnetoresistance in a Hybrid Structure of Graphene and Yttrium Iron Garnet // Phys. Rev. Lett. — 2015. — № 115. — P. 226601.
- [4] Leutenantsmeyer J. C., Kaverzin A. A., Wojtaszek M., van Wees B. J. Proximity induced room temperature ferromagnetism in graphene probed with spin currents // 2D Mater. — 2016. — № 4. — P. 014001.
- [5] Han W., Kawakami R. K., Sachs R., Gmitra M., Fabian J. Graphene spintronics // Nat. Nanotechnol. — 2014. — № 9. — P. 794.
- [6] Zollner K., Gmitra M., Frank T., Fabian J. Theory of proximity-induced exchange coupling in graphene on hBN/(Co,Ni) // Phys. Rev. B — 2016. — № 94. — P. 155441.
- [7] Cardoso C., Soriano D., Garcia-Martinez N. A., Fernandez-Rossier J. Van der Waals Spin Valves // Phys. Rev. Lett. — 2018. — № 121. — P. 067701.
- [8] Zollner K., Gmitra M. and Fabian J. Electrically tunable exchange splitting in bilayer graphene on monolayer $\text{Cr}_2\text{X}_2\text{Te}_6$ with X = Ge, Si, and Sn // New J. Phys. — 2018. — № 20. — P. 073007.
- [9] Дресвянкин Д.Н., Рожков А.В., Сбойчаков А.О. Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке // Письма в ЖЭТФ — 2021. — № 114. — С. 824.
- [10] Aleiner I. L., Kharzeev D. E. and Tsvelik A. M Spontaneous symmetry breaking in graphene subjected to an in-plane magnetic field // Phys. Rev. B — 2007. — № 76. — P. 195415.
- [11] Rakhmanov A. L., Rozhkov A. V., Sboyachkov A. O. and Nori F. Instabilities of the AA-Stacked Graphene Bilayer // Phys. Rev. Lett. — 2012. — № 109. — P. 206801.

- [12] Sboychakov A. O., Rozhkov A. V., Rakhmanov A. L. and Nori F. Antiferromagnetic states and phase separation in doped AA-stacked graphene bilayers // Phys. Rev. B — 2013. — № 88. — P. 045409.
- [13] Гобелко И.Е., Рожков А.В., Дресвянкин Д.Н. Переход металл-диэлектрик и другие электронные свойства двухслойного АВ-графена на ферромагнитной подложке // Письма в ЖЭТФ — 2023. — № 118. — С. 689.
- [14] Phong V. T., Walet N. R., Guinea F. Effective interactions in a graphene layer induced by the proximity to a ferromagnet // 2D Materials — 2017. — № 5. — P. 014004.

GRAPHENE ON A FERROMAGNETIC SUBSTRATE: INSTABILITY OF THE ELECTRONIC LIQUID

D.N. Dresvyankin¹, A.V. Rozhkov^{*2}, A.O. Sboychakov²

¹ Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

² Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* alex.vl.rozhkov@yandex.ru

Abstract

We previously show [JETP Letters, 114, 763 (2021)] that a graphene sample placed on a ferromagnetic substrate demonstrates a cooperative magnetoelectronic instability. The instability induces a gap in the electronic spectrum and a canting deformation of the magnetization near the graphene-substrate interface. In this paper we prove that the interaction between the electrons in graphene strongly enhances the instability. Our estimates suggest that in the presence of even a moderate interaction the instability can be sufficiently pronounced to be detected experimentally in a realistic setting.

Key words: graphene, ferromagnetic substrate, canted magnetization, magnetoelectronic instability, spin density wave, spectrum gap

СТЕКЛОМЕТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОРОШКОВЫЙ ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КОМПОЗИТАХ, ПРЕДНАЗНАЧЕННЫХ ДЛЯ СВЧ ДИАПАЗОНА

Р.А. Князьков * ¹, С.Н. Старостенко¹, А.В. Артемова¹, И.В. Комаров¹, А.В. Долматов¹,
А.О. Ширяев¹, П.А. Иванов¹, А.В. Осипов¹, Д.А. Петров¹, С.А. Маклаков¹,
П.А. Зезюлина¹, Н.А. Бузников¹, С.С. Маклаков¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 27.08.2024

Одобрена после рецензирования 05.09.2024

Принята к публикации 18.09.2024

Аннотация

Предложен метод синтеза порошкового композитного материала из порошков металла и стекла. Синтез проводится спеканием смеси порошков стекла и карбонильного железа Р-20 в атмосфере аргона при температуре от 800 до 1000 °С, затем полученный слиток измельчается. Для обеспечения однородности композита синтез проводится в две стадии с промежуточной гомогенизацией (размолотом и повторным спеканием). Стойкость стеклометаллического порошка к окислению на воздухе сравнивается со стойкостью карбонильного железа на основе данных термогравиметрических измерений. Конечный порошок с размером частиц 100-400 мкм используется для приготовления модельных композитов с парафином в качестве связующего. Материальные параметры (μ , ε) этих композитов измерены в полосе частот 0,1 - 20 ГГц. Приводится сравнение спектров отражения слоя модельного композита на металлической подложке со спектрами отражения композитов с карбонильным железом в сантиметровом диапазоне длин волн. По модели смешения Брюггемена делается оценка материальных параметров частиц порошка, по этим параметрам делается расчёт спектра отражения сплошного слоя стеклометаллического композита.

Ключевые слова: высокочастотные измерения, композитные материалы, формулы смешения, окисление железа, СВЧ магнитная проницаемость, диэлектрическая проницаемость

EDN KPFDIR

doi:[10.24412/2949-0553-2024-412-21-29](https://doi.org/10.24412/2949-0553-2024-412-21-29)

Введение

Получение материалов для СВЧ диапазона, работоспособных в окислительной среде при температурах порядка 600 - 1000 °С, является сложной научной и инженерной задачей. Одним из возможных путей получения таких материалов является образование защитных оболочек на электропроводящих или ферромагнитных частицах [1, 2]. В работе рассматриваются материальные параметры порошков, полученных сплавлением дисперсных частиц стекла с железом, и оценивается возможность образования защитной оболочки из плавленого стекла на частицах железа. На описываемом этапе исследований для улучшения условий синтеза использовалось легкоплавкое силикатное стекло.

Ниже излагается методика получения порошков гетерогенной системы железо-стекло (стеклометаллокерамики), приводится оценка их микроструктуры и стойкости к окислению на воздухе. Полученные порошки стеклометаллокерамики используются как наполнители модельных композитов на основе парафина. Образцы из модельных композитов используются для измерения частотных зависимостей материальных параметров, для аппроксимации измеренных зависимостей выбирается

* Автор, ответственный за переписку: Роман Альбертович Князьков, knyazkov@itae.ru

модель смешения, соответствующая структуре композита, по модели смешения делается оценка частотной зависимости проводимости и магнитной проницаемости частиц синтезированного порошка. Проводится сравнение эффективности однослойного сверхвысокочастотного (СВЧ) поглотителя на основе композита с порошком стеклометаллокерамики с эффективностью слоя такой же толщины из композитов с различным наполнением карбонильным железом.

Методика изготовления образцов и измерений материальных параметров

Первым компонентом сплава является карбонильное железо Р20 (средний диаметр частиц ~ 2 мкм [3]), вторым – измельченное до размера частиц менее 125 мкм (порошок просеивался через сито) натриевое медицинское обесцвеченное стекло марки МТО плотностью $2,5 \text{ г/см}^3$ [4].

Компоненты смеси замешивались в равных объемных долях и спекались в алундовом тигле в атмосфере аргона при температуре от 800 до 1000°C в течение 6 ч. В результате спекания получались визуально плотные отливки стеклометаллокерамики, имеющие металлический блеск и хрупкость стекла. Далее отливки измельчались в агатовой ступке и просеивались через калиброванные сита для получения порошков желаемой дисперсности. Плотность порошка стеклометаллокерамики оценивалась пикнометрически и составляла $\sim 5,2 \text{ г/см}^3$.

Микроструктура полученных порошков стеклометаллокерамики оценивалась по микрофотографиям (Рис. 1)), полученным на сканирующем электронном микроскопе JEOL JCM-700.

Оценка микроструктуры порошков, полученных при однократном спекании и размоле слитка, показала наличие крупных частиц стекла без включений железа, поэтому для улучшения однородности исследуемого порошка спекание и размол (механическая гомогенизация смеси железо-стекло) проводились последовательно в две стадии.

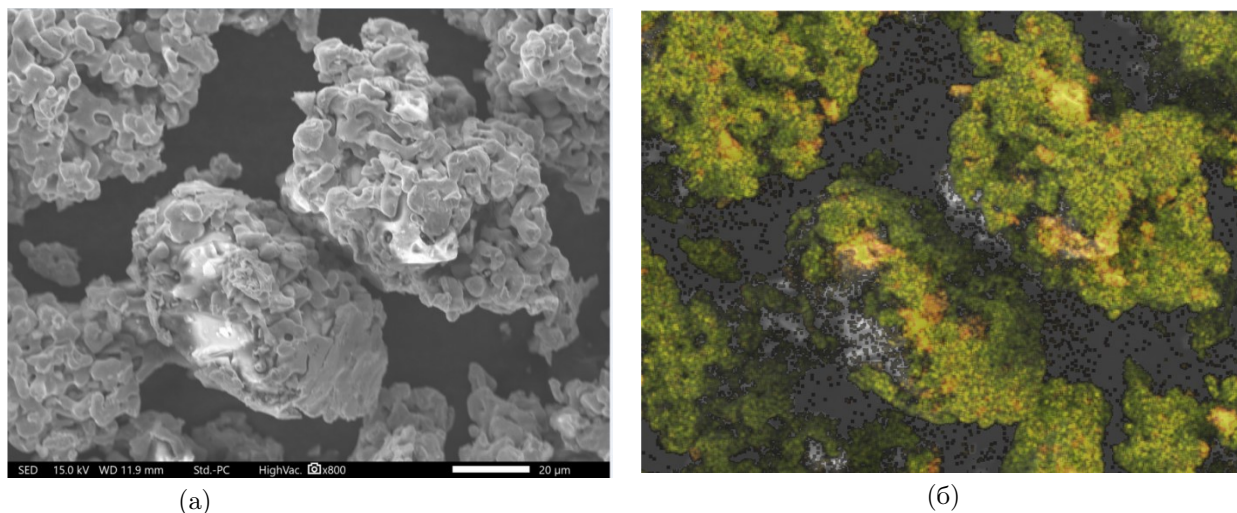


Рисунок 1 – а) микрофотография частиц порошка стеклометаллокерамики; б) распределение железа и кремния на поверхности частиц (Fe окрашено зеленым, Si - оранжевым цветом) по данным локального рентгеноспектрального анализа

Стойкость порошков к окислению на воздухе оценивалась по результатам дифференциально-термического (ДТА) и термогравиметрического (ТГА) анализов на приборе синхронного термического анализа Netzsch STA449 при скорости нагрева $\sim 10 \text{ К/мин}$. Навески исследуемых порошков составляли $\sim 10 - 30 \text{ мг}$, нагрев проводился от комнатной температуры до $\sim 1000^\circ \text{C}$. Доля окисленного железа рассчитывалась по увеличению веса образца, баланс масс рассчитывался в предположении полного окисления в соответствии с реакцией $6\text{Fe} + 3\text{O}_2 = 3\text{Fe}_2\text{O}_3$. Температура начала реакции окисления определялась дифференцированием кривых ДТА и ТГА.

В связи с тем, что кинетика окисления обусловлена удельной поверхностью железа, которая в исследуемых порошках существенно меньше, чем у карбонильного железа, при выбранной скорости нагрева полное окисление за время измерения не могло быть достигнуто. Поэтому навеска исследуемого порошка стеклокерамики помещалась в муфельную печь и выдерживалась на воздухе при температуре 1000°C в течение 6 часов. Доля оставшегося железа определялась по изменению массы образца так же, как и при ТГА измерениях.

Образцы модельных композитов для измерений материальных параметров изготавливались путём перемешивания полученных порошков с размером частиц менее 120 мкм в расплавленном парафине

(диэлектрическая проницаемость парафина $\varepsilon \approx 2,2$) до достижения визуально равномерного распределения частиц. Из смеси прессовались шайбы, соответствующие размерам стандартной коаксиальной ячейки 3×7 мм, толщина шайб составляла $\sim 2-3$ мм. Объёмная доля порошка стеклометаллокерамики в модельных образцах контролировалась по плотности шайб ($\rho = 2,54$ г/см³) и составляла 40 % об.

Аналогичным образом были изготовлены образцы сравнения, содержащие 20, 30 и 40 об. % карбонильного железа P20 в парафине.

Измерения диэлектрической и магнитной проницаемостей модельных композитов и образцов сравнения проводились в полосе частот 0,1 – 20 ГГц при помощи векторного анализатора цепей Keysight N5224В методом отражения прохождения [5].

Полученные результаты и их обсуждение

На Рис. 2 приведены кривые тепловыделения (кривые ДТА) и изменения веса (кривые ТГА) навесок карбонильного железа P20 и исследуемого порошка стеклометаллокерамики при нагреве на воздухе до ~ 1000 °С. Видно, что интенсивное окисление порошка железа P20 происходит (точка перегиба на кривой ТГ и максимум на кривой ДТА) при ~ 400 °С, тогда как интенсивное окисление порошка стеклометаллокерамики идет при $\sim 500-600$ °С. К 900 °С практически всё карбонильное железо P20 превращается в Fe_2O_3 , а железо в порошке стеклометаллокерамики окисляется гораздо медленнее (при выбранной скорости нагрева при 900 °С неокисленным остается около 13,2 % Fe).

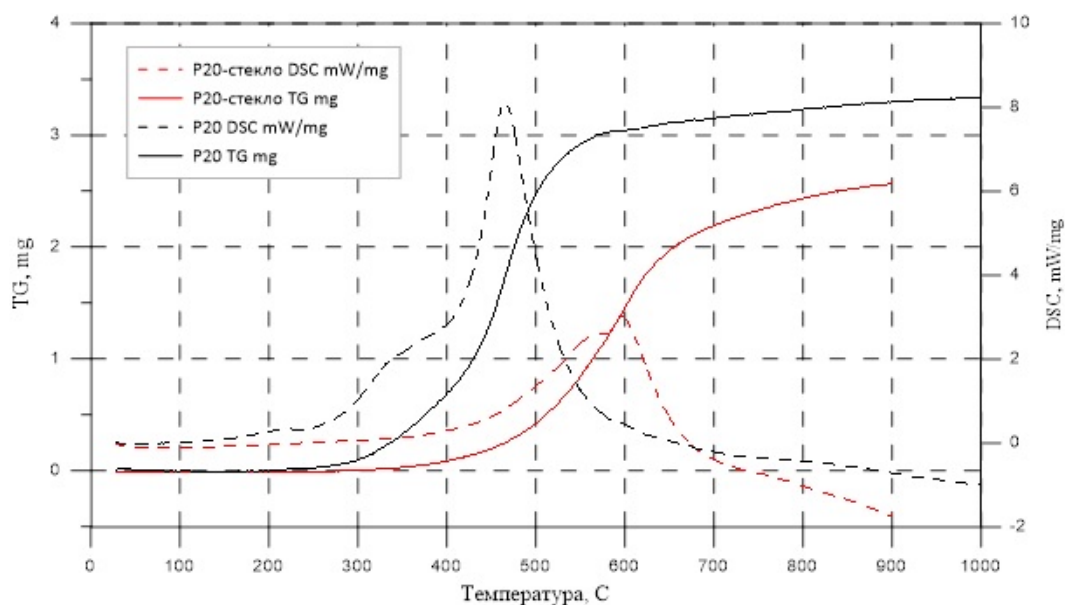


Рисунок 2 – Кривые изменения веса образца (сплошные линии) и теплового эффекта (пунктирные линии) при нагреве карбонильного железа P20 (черные линии) и порошка стеклометаллокерамики (красные линии). Кривые изменения веса образцов и тепловых эффектов пересчитаны на одинаковое весовое содержание железа (8,59 мг)

Дополнительно была оценена стойкость к окислению исследуемого порошка при длительном нагреве на воздухе. Отжиг навески порошка стеклометаллокерамики (36 мг) при 1000 °С в течение 6 ч (привес 11 мг) показал, что после отжига порошок стал немагнитным, а увеличение веса образца свидетельствует о том, что всё железо превратилось в окисел Fe_2O_3 . Необходимо отметить, что по данным ДТА и ТГ интенсивное окисление карбонильного железа, химически покрытого оболочкой SiO_2 , происходит при ~ 750 °С [2], поэтому можно ожидать, что при температурах ниже ~ 600 °С (Рис. 2) исследуемый порошок будет стоек к окислению длительное время.

Оценки сопротивления порошка стеклометаллокерамики, спрессованного без связующего, показывают, что полученный порошок является электропроводящим. По-видимому, это связано с отсутствием изолирующей оксидной или стеклянной оболочки на поверхности частиц. Электропроводность в сочетании с хрупкостью полученных при спекании отливок стеклометаллокерамики косвенно указывают на формирование симметричной структуры железо-стекло, то есть структуры, в которой сложно разделить компоненты на матрицу и наполнитель, что подтверждается электронной микроскопией. Из Рис. 1 видно, что сферические частицы железа в порошке стеклометаллокерамики отсутствуют, а видимое на поверхности частиц железо является лишь выходящей на поверхность частью объёмной сетки железа, так как объёмная доля железа в частицах составляет 50 %.

Вероятно, атмосфера аргона, в которой производилось сплавление порошков стекла и железа, препятствует образованию поверхностной оксидной пленки на частицах железа, что, в свою очередь, затрудняет смачивание металла стеклом, а скорость диффузионного переноса железа в область контакта частиц металла лимитируется только температурой. В результате при выбранном методе синтеза в стеклометаллокерамике формируются взаимопроникающие сетки железа и стекла, то есть формируется симметричная смесь [6]. Такая смесь представляет собой перколяционную структуру, материальные параметры которой описываются в рамках теории эффективной среды (ТЭС).

На Рис. 3 представлены измеренные частотные зависимости материальных параметров модельных композитов, содержащих 40 % об. полученного порошка, а также материальных параметров модельных композитов с железом P20, содержащих такую же объемную долю P20, как и композиты с синтезированным порошком (40 % об.), и объемную долю P20, равную объемной доле железа в композитах с порошками сплава железо-стекло (20 % об.).

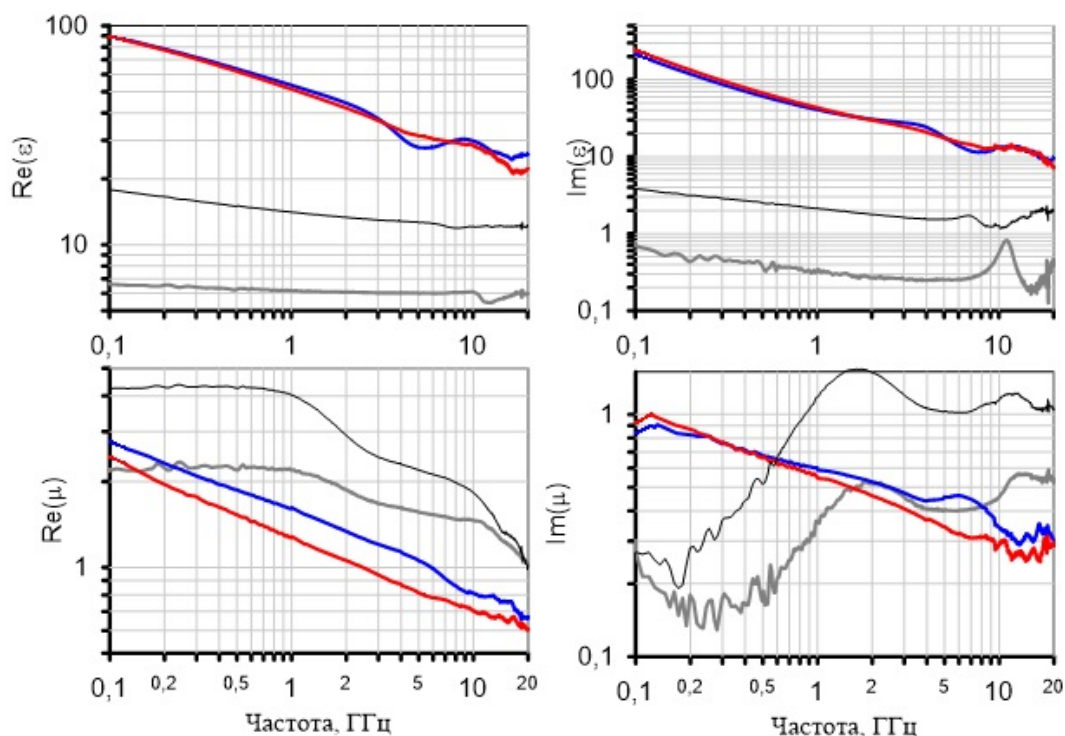


Рисунок 3 – Измеренные частотные зависимости диэлектрической ε и магнитной μ проницаемостей модельных композитов. Синие и красные линии – 40 % об. порошка стеклометалла ($\rho_{mix} = 2,54 \text{ г/см}^3$), синие линии соответствуют образцу с порошком, полученным в одну стадию (без промежуточной гомогенизации), черные и серые линии – 40 и 20 % об. железа P20, $\rho = 3,8 \text{ г/см}^3$ и $\rho = 2,3 \text{ г/см}^3$ соответственно

Привлекает внимание необычный для композитов с карбонильным железом, практически линейный в логарифмических координатах вид частотной дисперсии материальных параметров композита с порошком стеклометаллокерамики (красные и синие линии на Рис. 3). Подобный вид частотной зависимости мнимой части диэлектрической проницаемости (ε'') характерен для электропроводящих композитов, то есть перколяционный тип структуры наполнителя сохраняется и при разбавлении порошка стеклометаллокерамики парафином. По-видимому, чистый неокисленный металл на поверхности частиц стеклометаллокерамики даёт хороший контакт между частицами, сохраняющийся даже при разбавлении порошка стеклометаллокерамики парафином. Похожий эффект известен для композитов с восстановленным в водороде карбонильным железом: при одинаковой объемной концентрации композит с восстановленным железом является электропроводящим, а с исходным карбонильным железом – диэлектриком [3].

Электропроводящие композиты являются симметричной системой, наполненной проводящим компонентом выше порога перколяции, частотная зависимость материальных параметров таких композитов описывается ТЭС, простейшим случаем ТЭС является модель Брюггемана. Матричные модели смешения при непроводящем связующем (парафин) такую зависимость $\varepsilon''(f)$ не могут описать в принципе [6].

Измеренная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости модельных композитов от частоты $\varepsilon(f)$ аппроксимирована по обобщенной на эллипсоидальную форму частиц формуле

Брюггемана:

$$\frac{p(\chi_{12} - \chi_{32})}{1 + N\chi_{12} + \chi_{32}(1 - N)} = \frac{(1 - p)\chi_{32}}{1 + \chi_{32}(1 - N)}. \quad (1)$$

В этом выражении p – объёмная доля частиц порошка (компонента 1) в смеси, χ_{32} – измеренные диэлектрическая $(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)/\varepsilon_2$ или магнитная $\mu_3 - 1$ восприимчивости смеси (компонента 3), нормированные на соответствующую проницаемость парафина (компонента 2), а χ_{12} – соответствующая восприимчивость $((\varepsilon_3 - \varepsilon_2)/\varepsilon_2$ или $\mu_1 - 1$) частицы порошка.

В выражении (1) и далее компоненты смеси обозначаются индексами при соответствующих проницаемостях или восприимчивостях, компонент 1 представляет собой материал частиц порошка (стеклометаллокерамику), компонент 2 – материал связующего (парафин), компонентом 3 обозначен сам исследуемый композит.

Коэффициент деполяризации N зависит от формы частицы и аналитически рассчитывается только для эллипсоидов. Обычно форма частиц аппроксимируется эллипсоидом вращения с диаметром D и длиной оси вращения d . При форме эллипсоида, сильно отличной от шара, восприимчивость смеси определяется минимальным коэффициентом деполяризации (сравнительный вклад поляризации вдоль других осей пренебрежимо мал), соответствующим более длинной оси. Минимальный коэффициент деполяризации вытянутого эллипсоида (нити, $d > D$) и сплюснутого эллипсоида (диска, $d < D$) определяется [7] выражениями (2) и (3) соответственно:

$$N = \frac{1}{(d/D)^2 - 1} \times \left[\frac{d/D}{\sqrt{(d/D)^2 - 1}} \times \text{ArcCosh} \left(\frac{d}{D} \right) - 1 \right], \quad (2)$$

$$N = \frac{1}{2} - \frac{1}{2 - 2(d/D)^2} \times \left[1 - \frac{d/D}{\sqrt{1 - (d/D)^2}} \times \text{ArcCos} \left(\frac{d}{D} \right) \right]. \quad (3)$$

В модели Брюггемана (1) порог перколяции обусловлен только формой частиц и равен N . Модель (1) выбрана в связи с тем, что более точные модели (например, модель Сихволы и инверсно-матричная модель [6]) имеют большее число свободных параметров (2 и 3, соответственно), а исследовались образцы модельных композитов с единственной концентрацией в 40 % об. частиц стеклометаллокерамики. Очевидно, что модель тем точнее может аппроксимировать экспериментальные данные, чем больше в ней свободных параметров. Однако при ограниченном объеме экспериментальных данных, а именно при единственной концентрации синтезированного порошка в модельных композитах, выбор более сложных моделей смещения нецелесообразен, так как увеличение числа свободных параметров ведет к падению достоверности выбора модели.

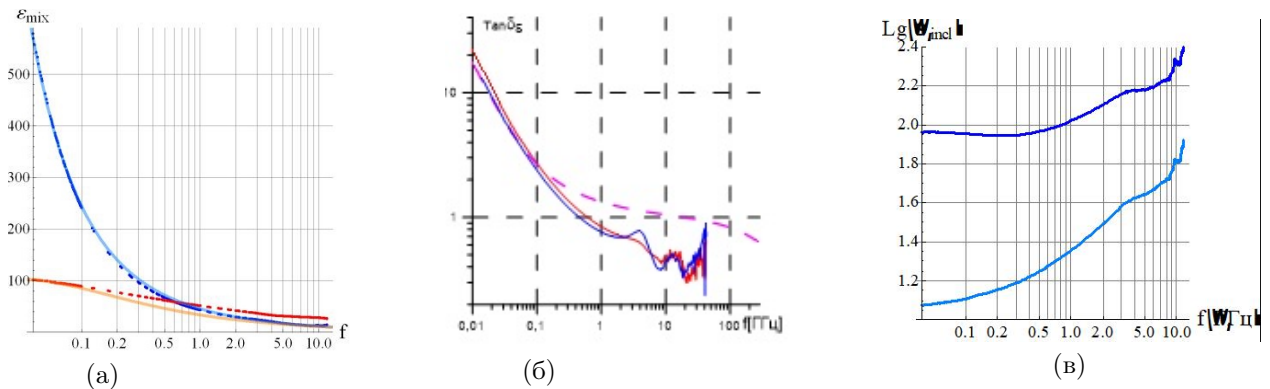


Рисунок 4 – а) Измеренная (синяя и красная линии) и аппроксимированная (голубая и оранжевая линии) по модели Брюггемана частотная зависимость ε композита с 40 % об. порошка железо-стекло;

б) Измеренные (синяя линия соответствует композиту с порошком, полученным в одну стадию без промежуточной гомогенизации, красная линия – в две стадии с промежуточным помолом) и расчётная (красный пунктир) частотная зависимость тангенса диэлектрических потерь модельного композита с 40 % об. синтезированного порошка;

в) Рассчитанные частотные зависимости проводимости частиц порошка железо-стекло для $N = 1/3$ и для $N = 0.39$ – голубая и синяя линии соответственно

Для оценки адекватности выбранной модели смешения исследуемым композитам на Рис. 4а представлено сравнение измеренной и найденной по формуле (1) с численной минимизацией невязки между измеренными и рассчитанными частотными зависимостями диэлектрической проницаемости. При минимизации предполагалось, что проводимость частиц не зависит от частоты $\sigma_1 = const$, действительная часть диэлектрической проницаемости частиц равна единице $\epsilon'_3 = 1$, а параметрами минимизации являлись коэффициент деполяризации N и проводимость частиц σ_1 . В результате были получены величины $\sigma_1 \approx 94 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ и $N \approx 0,39$.

На Рис. 4а представлены измеренные и рассчитанные по модели (1) при найденной проводимости и коэффициенте деполяризации частотные зависимости мнимой ϵ''_3 и действительной частей ϵ'_3 диэлектрической проницаемости модельного композита. Видно, что наибольшая невязка наблюдается по ϵ'_3 , эта невязка растёт с увеличением частоты от пренебрежимо малой на частотах ниже 100 МГц до $\sim 10\%$ на 10 ГГц.

На Рис. 4б представлены измеренные и рассчитанные частотные зависимости тангенса диэлектрических потерь модельного композита, S-образный вид кривых и малое расхождение между измеренными и рассчитанными величинами ϵ (Рис. 4а) подтверждает справедливость применения модели ТЭС (1) для описания исследуемых композитов.

Следует отметить, что обобщенная модель Брюггемана (1) является полуэмпирической, в выведенной Брюггеманом оригинальной формуле частицы имеют сферическую форму ($N = 1/3$) [6]. При выбранной величине N возможен прямой пересчёт (с точным совпадением измеренных и рассчитанных величин восприимчивостей композита $\chi_{32meas} == \chi_{32calc}$) измеренных материальных параметров композита в диэлектрическую и магнитную восприимчивости частиц χ_{12} синтезированного порошка:

$$\chi_{12} = \chi_{32} \frac{1 + (1 - N) \chi_{32}^2}{p - \chi_{32} (N - p)} \quad (4)$$

и, соответственно, диэлектрической восприимчивости χ_{32} в проводимость σ_1 частиц:

$$\sigma_1 = 2\pi f \epsilon_0 \epsilon_1'' = 2\pi f \epsilon_0 \epsilon_2'' \chi_{12}'' = 2\pi f \epsilon_0 \epsilon_2'' \text{Im} \left[\chi_{32} \frac{1 + (1 - N) \chi_{32}}{p + (p - N) \chi_{32}} \right] \quad (5)$$

Результаты этих расчётов приведены на Рис. 4в в виде частотных зависимостей проводимости частиц порошка железо-стекло в предположении сферических частиц порошка стеклометаллокерамики ($N = 1/3$) и для найденной минимизацией величины коэффициента деполяризации ($N = 0,39$). Видно, что при $N = 0,39$ найденная точным расчётом проводимость частиц слабо растёт с увеличением частоты (Рис. 4в). Такой рост может быть связан как с погрешностью измерений материальных параметров, так и с неточностью используемой модели. Важно, что найденная величина эффективной проводимости стеклометаллокерамики оказывается примерно на $4 \div 5$ порядков ниже проводимости чистого железа. При столь низкой проводимости частиц σ_1 вклад скин-эффекта в измеренные частотные зависимости материальных параметров композитов со средним размером порошка стеклометаллокерамики $\sim 50 \text{ мкм}$ (Рис. 1) пренебрежимо мал.

На Рис. 5а представлены измеренная и рассчитанная при $N \approx 0,39$ частотная зависимость магнитной проницаемости композита, а на Рис. 5б – рассчитанная из (1) магнитная проницаемость частицы металлокерамики.

Очевидно, что чем меньше величина восприимчивости χ_{12} в формуле (1), тем ниже влияние коэффициента деполяризации на восприимчивость композита χ_{32} . Величина магнитной восприимчивости частиц порошка χ_{12} много меньше величины их диэлектрической восприимчивости, поэтому рассчитанные при $N = 1/3$ и при $N = 0,39$ частотные зависимости собственной магнитной проницаемости частиц стеклометаллокерамики практически совпадают (Рис. 5б). Можно заметить, что эти частотные зависимости близки по характеру кривых к дисперсионным зависимостям собственной магнитной проницаемости частиц карбонильного железа, приведенным в работе [8], хотя абсолютные величины проницаемости для частиц стеклометаллокерамики оказываются на порядок ниже. Это может быть связано как с разбавлением железа стеклом, так и с изменением магнитных свойств железа при переходе от монолитной сферической частицы к разреженной сетчатой структуре.

Разумеется, оценка свойств частиц стеклометаллокерамики по формулам (3, 4) является лишь грубой первичной оценкой, для уточнения величины проводимости и собственной магнитной проницаемости частиц необходимо исследовать дисперсионные зависимости материальных параметров серии композитов с широким диапазоном концентраций этих частиц. Кроме того, следует учесть, что проводимость реальной симметричной структуры обусловлена не только проводимостью компонентов композита, но и контактными явлениями, никак не учитываемыми в моделях смешения. Поэтому истин-

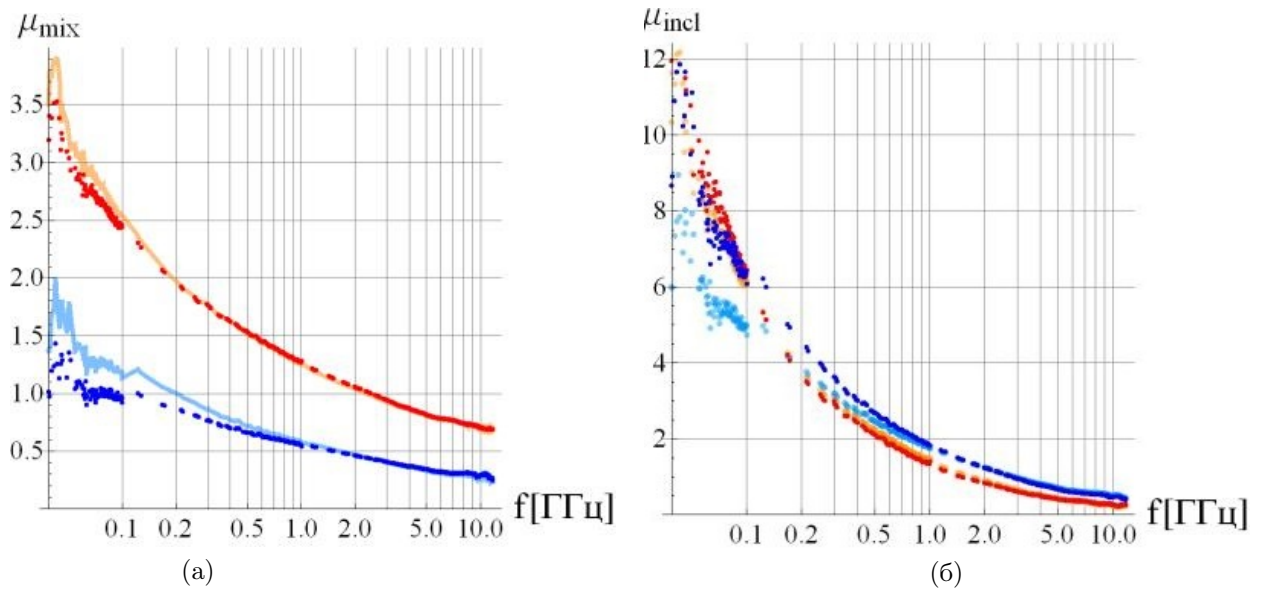


Рисунок 5 – а) измеренная (μ' - красные, μ'' - синие точки) и рассчитанная по формуле (3) магнитная проницаемость (μ' - желтая и μ'' - голубая линии соответственно) модельного композита с порошком металлокерамики железо-стекло;

б) рассчитанная по формуле (1) при $N = 1/3$ (μ'' - голубые и μ' - желтые точки) и при $N = 0,39$ (μ' - красные и μ'' - синие точки) частотная зависимость магнитной проницаемости частицы металлокерамики железо-стекло

ная проводимость синтезированных частиц или слитка сплава железо-стекло может быть существенно выше величины, определенной по модели Брюггемана $\sigma_1 \approx 94 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$.

Измеренные частотные зависимости материальных параметров модельных композитов (Рис. 3) позволяют сравнить эффективность синтезированного порошка железо-стекло с эффективностью железа Р20 в качестве наполнителя простейшего однослойного РПМ.

На Рис. 6 представлены расчётные спектры отражения от 1,5 мм слоя модельного композита с 40 % синтезированного порошка, а также от модельных образцов сравнения, содержащих 20, 30 и 40 % об. карбонильного железа в парафине (Рис. 3). Видно, что частота минимума отражения композита с синтезированным порошком близка к частоте минимума отражения композита, содержащего ~ 30 % об. карбонильного железа, при этом полоса поглощения по уровню минус 10 дБ оказывается за счёт избыточных потерь сужена в 1,8 раза (зелёная и красная кривые на Рис. 6). Суммарные потери в слое с порошком стеклометаллокерамики оказываются даже выше, чем в слое с равной объёмной долей (40 % об.) железа Р20 (синие и зелёная кривые описывают резонанс с более высокой добротностью, чем красная кривая).

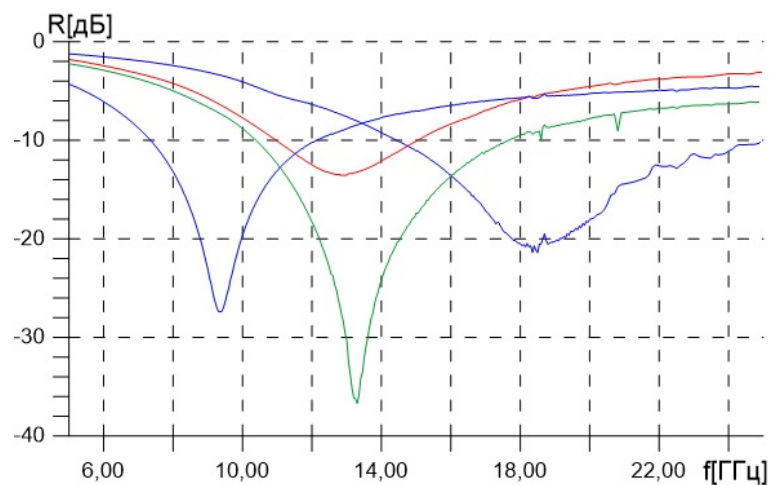


Рисунок 6 – Рассчитанная частотная зависимость коэффициента отражения на металлической подложке 1,5 мм слоя композита с 40 % об. порошка стеклометаллокерамики в парафине (красная кривая, $\rho = 2,54 \text{ г/см}^3$), а также 1,5 мм слоев с 40 % об., $\rho = 3,8 \text{ г/см}^3$, 20 % об., $\rho = 2,2 \text{ г/см}^3$ (синие кривые) и 30 % об., $\rho = 2,95 \text{ г/см}^3$ Р20 в парафине (зелёная кривая)

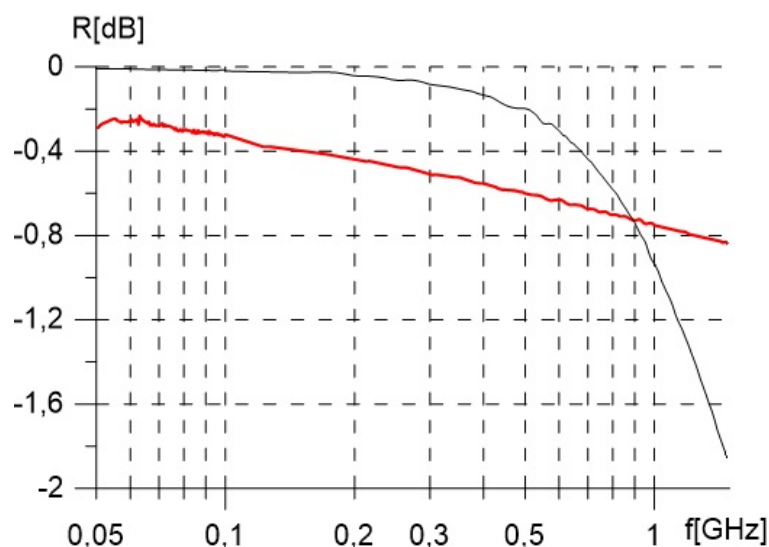


Рисунок 7 – Спектр отражения 1,5 мм слоя на металлической подложке с 100 % порошка металлокерамики железо-стекло ($\rho = 5,2 \text{ г/см}^3$, вес слоя $7,8 \text{ кг/м}^2$) – красная кривая, 2,05 мм слоя с 40 % P20 на металле ($\rho = 3,8 \text{ г/см}^3$, вес слоя $7,8 \text{ кг/м}^2$) – чёрная кривая

Таким образом, стекло в композите с железом не является пассивным балластом, а меняет как проводимость, так и магнитные свойства частицы металлокерамики (Рис. 5б) по сравнению с частицей железа.

Снижение проводимости металлокерамики железо-стекло по сравнению с чистым железом на ~ 4 порядка может позволить использовать слой такого сплава как развитый по толщине скин-слой (поглотитель полубесконечный в широкой полосе частот).

Для оценки эффективности такого подхода на Рис. 7 приведены частотные зависимости коэффициента отражения 1,5 мм слоя металлокерамики на идеально проводящей подложке и равного по весу 2,05 мм слоя с 40 % об. карбонильного железа.

Из этого рисунка видно, что на частотах ниже $\sim 1 \text{ ГГц}$ при равном весе единицы площади 1,5 мм слой металлокерамики имеет меньший коэффициент отражения, чем 2 мм слой, содержащий 40 % об. железа P20. То есть при проводимости $\sigma \approx 90 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ тонкий слой металлокерамики может использоваться как практически непрозрачный слой (поглощающая подложка с мало зависимым от частоты импедансом) в многослойных РПМ.

5. Заключение

Синтезирован порошок металлокерамики железо-стекло, имеющий существенно меньшую скорость окисления на воздухе при температуре $\sim 600^\circ \text{C}$, чем карбонильное железо, интенсивно окисляющееся уже при 450°C (Рис. 2). Меньшая скорость и более высокая температура окисления связаны, вероятно, с уменьшением свободной поверхности железа в частице стеклометаллокерамики по сравнению с чистым металлом. При этом длительный отжиг порошка при 1000°C приводит к полному окислению железа как с поверхности, так и внутри частиц стеклометаллокерамики.

Показано, что модельные композиты с синтезированным порошком имеют симметричную структуру, материальные параметры которой описываются ТЭС.

Оценочные расчёты по модели Брюггемана показывают, что синтезированный порошок имеет проводимость на ~ 5 порядков ниже, чем проводимость массивного железа. При столь низкой проводимости и размере частиц стеклометаллокерамики менее 100 мкм вклад скин-эффекта в диэлектрические и магнитные спектры композитов с такими порошками (Рис. 3) пренебрежимо мал.

Расчёты спектров отражения по измеренным частотным зависимостям материальных параметров модельных композитов с порошком стеклометаллокерамики и карбонильным железом показывают, что при толщине слоя 1,5 мм, частоте минимума отражения $\sim 13 \text{ ГГц}$, уровне отражения минус 10 дБ и плотности на 16 % ниже, чем композит с 30 % об. железа P20, материал с порошком стеклометаллокерамики обеспечивает полосу поглощения почти вдвое уже (4,0 ГГц, против 7,8 ГГц, см. Рис. 6).

В то же время сплошной слой стеклометаллокерамики за счет пониженной по сравнению с чистым металлом проводимости (Рис. 4в) имеет при одинаковом весе слоя заметно меньший коэффициент

отражения на частотах ниже ~ 1 ГГц (Рис. 7) по сравнению с композитом с 40 % об. железа Р20. Поэтому сплошной слой стеклометаллокерамики представляется перспективным в качестве прилегающего к металлу слоя в материалах для СВЧ диапазона.

Список литературы

- [1] Dolmatov A.V., Maklakov S.S., Artemova A.V., Petrov D.A., Shiryaev A.O., Lagarkov A.N., Deposition of thick SiO₂ coatings to carbonyl iron microparticles for thermal stability and microwave performance // Sensors. 2023. V. 23. No. 3. P. 1727.
- [2] Артёмова А.В., Маклаков С.С., Гаранов В.А., Беляйков И.Н. Анализ термической стойкости порошковых материалов на основе железа // Современная электродинамика. 2023. Т. 1. № 3. с. 36-41.
- [3] Волков В.Л., Сыркин В.Г., Толмасский И.С. Карбонильное железо. М.: Металлургия, 1969.
- [4] ГОСТ 19808-86 Стекло медицинское. Марки.
- [5] Nicolson A. M.; Ross G. F., Measurement of the Intrinsic Properties of Materials by Time-Domain Techniques. IEEE Transactions on instrumentation and measurement, vol. IM-19, No. 4, 377–382.
- [6] Старостенко С.Н., Розанов К.Н., Лагарьков А.Н., Модели смешения бинарных гетерогенных систем, Физика металлов и металловедение, 2021, т. 122, № 4, с. 1–23.
- [7] Moroz. A. Depolarization field of spheroidal particles. J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 26, p. 517-527, 2009.
- [8] Osipov A. V., Rozanov K. N., Simonov N. A., Starostenko S. N., Reconstruction of intrinsic parameters of a composite from the measured frequency dependence of permeability, J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 14, no. 41, 21 October 2002, pp. 9507-9523.

GLASS-METAL POWDER FERROMAGNETIC MATERIAL FOR USE IN COMPOSITES, INTENDED FOR MICROWAVE RANGE

R.A. Knyazkov^{*1}, S.N. Starostenko¹, A.V. Artemova¹, I.V. Komarov¹,
A.V. Dolmatov¹, A.O. Shiryaev¹, P.A. Ivanov¹, A.V. Osipov¹, D.A. Petrov¹,
S.A. Maklakov¹, P.A. Zezyulina¹, N.A. Buznikov¹, S.S. Maklakov¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* knyazkov@itae.ru

Abstract

A technique to synthesize a composite powder comprised of metal and glass is proposed. The composite is obtained by sintering at 800 до 1000 ° C in argon flow of glass and carbonyl iron powders. The synthesis is performed in two stages with an intermediate sintering and milling. The powder stability to oxidation while heating in air is compared with that of pure carbonyl iron powder. The obtained glass-metallic powder with the size about is 100-400 mcm was used to fill paraffin-bound composites. Complex permittivity and permeability of these composites were measured in the frequency band 0,1 - 20 GHz. The X-band reflectivity spectra of the composites are compared with that of similar composites with carbonyl iron. Constitutive parameters of a glass-metallic particle are retrieved applying the Bruggeman mixing model, the retrieved parameters are used to calculate the reflectivity spectrum of a shorted glassmetallic layer.

Key words: microwave measurements, composite materials, mixing formulas, iron oxidation, microwave permeability, permittivity

МОГУТ ЛИ ГАРМОНИКИ ФЛОКЕ РАССМАТРИВАТЬСЯ КАК ВИРТУАЛЬНЫЕ УРОВНИ, ВВОДИМЫЕ ДЛЯ ОБЪЯСНЕНИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ?

А.П. Виноградов * ^{1,2}, Е.С. Андрианов ^{1,2}

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

² Федеральное государственное унитарное предприятие “Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова”, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 02.09.2024

Одобрена после рецензирования 10.09.2024

Принята к публикации 18.09.2024

Аннотация

Во многих монографиях комбинационное рассеяние (КР) до сих пор объясняют как двухэтапный процесс. На первом этапе происходит поглощение кванта падающего излучения и переход молекулы в возбужденное состояние. На втором этапе происходит испускание фотона с частотой, отличной от частоты падающего фотона. Так как необходимых для поглощения фотона уровней в молекуле, как правило, нет, то их заменяют виртуальными уровнями. Однако обоснования существования виртуальных уровней на сегодня нет. Есть неясные утверждения о том, что при взаимодействии с внешним полем спектр молекулы перестраивается, и такие уровни возникают. В случае воздействия гармонического внешнего поля на двухуровневую систему (ДУС) гамильтониан периодически зависит от времени, что позволяет использовать теорию Флоке, предсказывающую появление в задаче частот Флоке, близких к частоте падающего поля. Показано, что такой подход не ведет к появлению ожидаемого уровня. Динамика системы сводится к известным осцилляциям Раби, а частоты Флоке не входят в конечный ответ.

Ключевые слова: рамановское рассеяние, виртуальные уровни, теорема Флоке

EDN IFEWGK

doi:[10.24412/2949-0553-2024-412-30-34](https://doi.org/10.24412/2949-0553-2024-412-30-34)

В 1923 году А. Смекаль [1,2], в своей работе рассмотрел задачу о нерезонансном рассеянии света на многоуровневом атоме. Обобщая гипотезу Бора ¹ о резонансном переходе атома под действием фотона из одного состояния в другое (см. [1]), А. Смекаль предположил, что при падении нерезонансного фотона атом может перейти из начального состояния в конечное, причем конечное состояние может обладать энергией как выше, так и ниже начального. Разность энергий начального и конечного состояний передается рассеянному фотону. В своей монографии [3] Г. Плачек указал на эту работу как на пионерскую работу, посвященную неупругому рассеянию света, и, обобщая ее, предложил описывать КР формулой Крамерса-Гайзенберга [4], в которой учитываются все возможные переходы между уровнями. Графически эти переходы представляются на диаграмме энергетических уровней [5]. Однако такое описание рамановского рассеяния требует существование в молекуле уровней, удовлетворяющих условию излучения стоксовских и анти-стоксовских фотонов. В случае КР излучается комбинированный квант, имеющий либо меньшую частоту, так называемый стоксовский квант, либо большую частоту, анти-стоксовский квант. Частоты стоксовского и анти-стоксовского квантов являются комбинациями частоты падающего излучения ω_{ext} и частоты ω_v , не зависящей от частоты падающего излучения. Частота стоксовского кванта равна $\omega_{ext} - \omega_v$, а анти-стоксовского $\omega_{ext} + \omega_v$. Частота ω_v зависит лишь от вида молекулы и лежит в ИК диапазоне. Предполагается, что ω_v – это частота внутримолекулярных

* Автор, ответственный за переписку: Алексей Петрович Виноградов, a-vinogr@yandex.ru

¹ Согласно представлениям Бора [6] о взаимодействии электромагнитного поля с атомом (молекулой) излучение/поглощение кванта света возможно только при переходе атома (молекулы) из одного состояния в другое, причем энергия этого кванта совпадает с разностью энергий состояний, между которыми совершается переход.

вибраций атомов. Предполагается, что мы имеем дело с раман-активными молекулами, у которых вибрации атомов не излучают свет [7]. Очевидно, что в силу произвольности частоты падающего излучения таких уровней нет. Данное объяснение было подправлено введением виртуальных уровней, удовлетворяющих этим условиям [7]. После чего, во всяком случае, рассеяние света объясняется как двухэтапный процесс поглощения/излучения фотона по Бору [8]. Природа (механизм) возникновения таких уровней не рассматривается, разумных причин для появления таких виртуальных уровней неизвестно, но во многих монографиях по КР до сих пор для объяснения КР используют эту схему.

Данная работа посвящена рассмотрению возможного механизма возникновения таких уровней.

Рассмотрим энергетический спектр атома, взаимодействующего, для простоты, с классическим полем. Не взаимодействующий атом будем моделировать двухуровневой системой (ДУС). Ограничимся дипольным приближением, когда член, отвечающий за взаимодействие ДУС с электромагнитным полем, представим в виде потенциала, зависящего от времени. В этом случае частота внешнего поля является одной из частот, характеризующих гамильтониан атома, и есть надежда на объяснение возникновения виртуальных уровней.

В приближении вращающейся волны это взаимодействие можно записать как [9]

$$\hat{V}(t) = \hbar\Omega_{ext} (\hat{\sigma} \exp(i\omega_{ext}t) + \hat{\sigma}^\dagger \exp(-i\omega_{ext}t)), \quad (1)$$

здесь Ω_{ext} – константа взаимодействия, $\hat{\sigma}^\dagger$, $\hat{\sigma}$ – операторы возбуждения и девозбуждения ДУС [10].

Очевидно, что, если включить в гамильтониан ДУС член (1), описывающий взаимодействие атома (ДУС) с классическим периодическим полем частоты ω_{ext} , то размерность гильбертова пространства не изменится.

Решения будем искать в базисе, образованном собственными функциями $|g\rangle$ и $|e\rangle$ невозмущенного потенциала $\hat{H}_{TLS} = (\hbar\omega_\sigma \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} + E_g \hat{I})$:

$$|\psi(t)\rangle = c_g(t) |g\rangle + c_e(t) |e\rangle, \quad (2)$$

здесь $|g\rangle$ основное состояние ДУС ($\hat{H}_{TLS} |g\rangle = E_g |g\rangle$), а $|e\rangle$ возбужденное состояние ($\hat{H}_{TLS} |e\rangle = (E_g + \hbar\omega_\sigma) |e\rangle = E_e |e\rangle$).

Подставляя (2) в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d(c_g(t) |g\rangle + c_e(t) |e\rangle)}{dt} = (\hat{H}_{TLS} + \hat{V}(t)) (c_g(t) |g\rangle + c_e(t) |e\rangle)$$

и проектируя полученное уравнение на базисные функции $\langle e|$ и $\langle g|$, получим систему двух линейных уравнений²:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_e}{dt} &= E_e c_e + \hbar\Omega_{ext} e^{-i\omega_{ext}t} c_g \\ i\hbar \frac{dc_g}{dt} &= E_g c_g + \hbar\Omega_{ext} e^{i\omega_{ext}t} c_e, \end{aligned} \quad (3)$$

здесь

$$\begin{aligned} V_{eg} &= \hbar\Omega_{ext} \langle \psi_e | \hat{\sigma} | \psi_g \rangle e^{i\omega_{ext}t} + \hbar\Omega_{ext} \langle \psi_e | \hat{\sigma}^\dagger | \psi_g \rangle e^{-i\omega_{ext}t} = \hbar\Omega_{ext} e^{-i\omega_{ext}t} \\ V_{ge} &= \hbar\Omega_{ext} \langle \psi_g | \hat{\sigma} | \psi_e \rangle e^{i\omega_{ext}t} + \hbar\Omega_{ext} \langle \psi_g | \hat{\sigma}^\dagger | \psi_e \rangle e^{-i\omega_{ext}t} = \hbar\Omega_{ext} e^{i\omega_{ext}t} \end{aligned} \quad (4)$$

ненулевые матричные элементы потенциала (1). В предположении дипольного взаимодействия матрица гамильтониана взаимодействия недиагональная. Согласно теореме Флоке (см. [11]), решениями уравнений (3) являются Флоке-гармоники $\exp(-i\omega_F t)$, умноженные на периодические с частотой ω_{ext} функции $\mathbf{f}(t)$:

$$\mathbf{c}_F(t) = \mathbf{f}(t) \exp(-i\omega_F t). \quad (5)$$

Раскладывая периодические функции $\mathbf{f}(t) = \{f_g(t), f_e(t)\}$ в ряд Фурье

$$f_g(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_g^{(n)} \exp(-i\omega_{ext}nt), \quad f_e(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_e^{(n)} \exp(-i\omega_{ext}nt), \quad (6)$$

²Проекция на состояние $\langle g|$ дает $i\hbar \frac{d(c_g(t) \langle g|)}{dt} = (\langle g| \hat{H}_{TLS} + \langle g| \hat{V}(t)) (c_g(t) |g\rangle + c_e(t) |e\rangle) = c_g(t) \langle g| \hat{H}_{TLS} |g\rangle + c_e(t) \langle g| \hat{V}(t) |e\rangle$, аналогично проекция на состояние $\langle e|$ дает $i\hbar \frac{dc_e(t)}{dt} = E_e c_e(t) + \langle e| \hat{V}(t) |g\rangle c_g = E_e c_e(t) + \hat{V}_{eg}(t) c_g$.

получим

$$\begin{aligned} c_g^F(t) &= \exp(-i\omega_F t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_g^{(n)} \exp(-i\omega_{ext} n t) \\ c_e^F(t) &= \exp(-i\omega_F t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_e^{(n)} \exp(-i\omega_{ext} n t). \end{aligned} \quad (7)$$

Наконец, подставляя (4), (6) в (3), получаем

$$\begin{aligned} \omega_F \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_e^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} + e^{(-i\omega_F t)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (n\omega_{ext}) f_e^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} \\ = E_e/\hbar \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_e^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} + \Omega_{ext} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_g^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} (n+1))t}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \omega_F \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_g^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} + e^{(-i\omega_F t)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\hbar n\omega_{ext}) f_g^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} \\ = E_g/\hbar \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_g^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} n)t} + \Omega_{ext} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_e^{(n)} e^{-i(\omega_F + \omega_{ext} (n-1))t}. \end{aligned} \quad (9)$$

Далее умножим обе части уравнения на $\exp(i(\omega_F + \omega_{ext} n_0)t)$ и проинтегрируем по периоду изменения внешнего поля. В уравнениях (8) и (9) остаются члены с коэффициентами, не зависящими от времени,

$$\hbar(\omega_F + n_0\omega_{ext}) f_e^{(n_0)} = E_e f_e^{(n_0)} + \hbar\Omega_{ext} f_g^{(n_0-1)} \quad (10)$$

$$\hbar(\omega_F + n_0\omega_{ext}) f_g^{(n_0)} = E_g f_g^{(n_0)} + \hbar\Omega_{ext} f_e^{(n_0+1)}. \quad (11)$$

Заметим, что в уравнении (8) член, связанный с взаимодействием пропорционален $f_g^{(n_0-1)}$, так как из условия $\omega_F + \omega_{ext} n_0 - \omega_F - \omega_{ext}(n+1) = 0$ следует, что $n_0 - (n+1) = 0 \Rightarrow n = n_0 - 1$. Аналогично из требования $\omega_F + \omega_{ext} n_0 - \omega_F - \omega_{ext}(n-1) = 0$ следует, что $n = n_0 + 1$. В дальнейшем удобно использовать вместо (11) уравнение с $n_0 \rightarrow n_0 - 1$

$$\hbar(\omega_F + (n_0 - 1)\omega_{ext}) f_g^{(n_0-1)} = E_g f_g^{(n_0-1)} + \hbar\Omega_{ext} f_e^{(n_0)}, \quad (12)$$

тогда уравнения (12) и (10) образуют систему однородных уравнений

$$\begin{aligned} -\Omega_{ext} f_g^{(n_0-1)} + (\omega_F + n_0\omega_{ext} - E_e/\hbar) f_e^{(n_0)} &= 0 \\ (\omega_F + (n_0 - 1)\omega_{ext} - E_g/\hbar) f_g^{(n_0-1)} - \Omega_{ext} f_e^{(n_0)} &= 0. \end{aligned}$$

Ненулевое решение возможно, если детерминант равен нулю

$$[(\omega_F + n_0\omega_{ext}) - E_e/\hbar][(\omega_F + n_0\omega_{ext}) - \omega_{ext} - E_g/\hbar] - \Omega_{ext}^2 = 0. \quad (13)$$

Удобно ввести $z = (\omega_F + n_0\omega_{ext})$, тогда решение (13) имеет вид для

$$z = (\omega_{ext} + E_g/\hbar + E_e/\hbar)/2 \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_{ext} + E_g/\hbar - E_e/\hbar)^2 + 4\Omega_{ext}^2} \quad (14)$$

или

$$\omega_F^{(n_0, \pm)} = (-n_0\omega_{ext} + \omega_{ext}/2) \pm \Omega_{\Delta}, \quad (15)$$

где $\Omega_{\Delta} = \sqrt{\Omega_{ext}^2 + (\Delta_{\omega}/2)^2}$, $\Delta_{\omega} = \omega_{\sigma} - \omega_{ext}$, $E_g = -\hbar\omega_{\sigma}/2$ и $E_e = \hbar\omega_{\sigma}/2$.

Заметим, что $\omega_F^{(n_0)} = \omega_F^{(0)} + n_0\omega_{ext}$ также является Флоке частотой, соответствующей той же гармонике Флоке. Действительно, при преобразовании $\omega_F^{(n_0)} = \omega_F^{(0)} + n_0\omega_{ext}$, $\mathbf{f}^{(n_0)}(t) = \mathbf{f}^{(0)}(t) \exp(in_0\omega_{ext}t)$ состояние атома $\mathbf{c}_F(t)$ не меняется:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_F(t) &= \mathbf{f}^{(0)}(t) \exp(-i\omega_F t) = [\mathbf{f}^{(0)} \exp(in_0\omega_{ext}t)] \exp(-i(\omega_F^0 + in_0\omega_{ext}t)t) \\ &= \mathbf{f}^{(n_0)}(t) \exp(-i\omega_F^{n_0} t), \end{aligned}$$

так как функция $\mathbf{f}^{(n_0)}(t)$ периодическая. Отметим, что отличие n_0 от нуля в формуле (15) не меняет состояние атома (5). Для каждого n_0 Фурье спектр (6) состоит из двух гармоник $f_g^{(n_0-1)}$ и $f_e^{(n_0)}$.

Иными словами, вместо основного и возбужденного состояний атома возникают два новых состояния с разными флоке-частотами

$$\omega_F^{(0,\pm)} = \omega_{ext}/2 \pm \Omega_\Delta, \quad (16)$$

а разница частот Флоке равна $\Delta\omega_F = 2\Omega_\Delta \neq \omega_{ext}$.

Два собственных вектора, $f_1^{(n_0,\pm)}$ и $f_2^{(n_0-1,\pm)}$ соответствующих флоке-частотам $\omega_F^{(n,\pm)}$, имеют вид:

$$\begin{pmatrix} f_1^{(n_0,+)} \\ f_2^{(n_0-1,+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \\ \frac{\Omega_\Delta - \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} f_1^{(n_0,-)} \\ f_2^{(n_0-1,-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \\ \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Из уравнения (7) находим собственные решения при любом n_0 . Для частоты $\omega_F^{(+)}$ решение имеет вид:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle^{(+,n_0)} &= \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i(-n_0\omega_{ext} + \omega_{ext}/2 + \Omega_\Delta + n_0\omega_{ext})t) |e\rangle \\ &+ \frac{\Omega_\Delta - \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i(-n_0\omega_{ext} + \omega_{ext}/2 + \Omega_\Delta + n_0\omega_{ext})t) |g\rangle \\ &= \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i(\omega_{ext}/2 + \Omega_\Delta)t) |e\rangle \\ &+ \frac{\Omega_\Delta - \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i(\omega_{ext}/2 + \Omega_\Delta)t) |g\rangle \equiv |\psi(t)\rangle^{(+)}. \end{aligned} \quad (18)$$

Аналогично для частоты $\omega_F^{(-)}$ получаем:

$$|\psi(t)\rangle^{(-)} = \frac{-\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} e^{(-i(\omega_{ext}/2 - \Omega_\Delta)t)} |e\rangle + \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} e^{(-i(\omega_{ext}/2 - \Omega_\Delta)t)} |g\rangle. \quad (19)$$

Как и ожидалось, решения (18) и (19) не зависят от $n\omega_{ext}$. Общее решение уравнения Шрёдингера имеет вид:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= c_1 \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i\omega_{ext}t/2) \exp(-i\Omega_\Delta t) |e\rangle \\ &+ c_1 \frac{\Omega_\Delta - \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(i\omega_{ext}t/2) (\exp(-i\Omega_\Delta t) |g\rangle) \\ &+ c_2 \frac{-\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(-i\omega_{ext}t/2) \exp(i\Omega_\Delta t) |e\rangle \\ &+ c_2 \frac{\Omega_\Delta + \Delta\omega/2}{2\Omega_\Delta} \exp(i\omega_{ext}t/2) (\exp(i\Omega_\Delta t) |g\rangle), \end{aligned} \quad (20)$$

коэффициенты $c_{1,2}$ определяются начальными условиями. Решение же (20), определяемое начальными условиями, представляет собой нерезонансные осцилляции Раби [12]. В резонансном случае $\Delta\omega = 0$, и с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |g\rangle$ в ответе получим резонансные осцилляции Раби: $\langle \hat{D}(t) \rangle = -\cos(2\Omega_{ext}t)$.

Таким образом мы видим, что хотя вместо основного и возбужденного состояний атома возникают два новых состояния с разными флоке-частотами (16), близкими к частоте падающего поля, тем не менее разность частот этих частот совпадает с частотой Раби. Возникшие состояния не обладают свойствами виртуальных уровней, необходимых для объяснения рассеяния света.

Список литературы

- [1] Smeckal A., Zur Quantentheorie der Dispersion // Naturwissenschaften. 1923. Т. II. s. 873–875.
- [2] Виноградов А.П., Лисянский А.А., Комментарий к статье А. Смекаля «К квантовой теории рассеяния» // Современная электродинамика. 2023. №. 4. с. 50-57.
- [3] Релеевское рассеяние и Раман эффект / Плачек Г. Харьков: ОНТИ, 1935. 180 с.
- [4] О квантовотеоретической интерпретации кинематических и механических соотношений в Избранные труды (В. Гейзенберг) / Гейзенберг В., М.: URSS, 2001. 616 с.
- [5] Jablonsi A., Efficiency of Anti-Stokes Fluorescence in Dyes // Nature. 1933. V. 131. pp. 839-840.
- [6] Атомная физика / Борн М. М.: Мир, 1970. 495 с.
- [7] The Raman Effect / Long D. F. Chichester: John Wiley & Sons, LTD, 2002. 597 с.
- [8] Квантовая электродинамика (Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Теоретическая физика в десяти томах, т. 4) / Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. – М: Издательство «Наука» Главная редакция физико-математической литературы, 1989. 728 с.

- [9] Quantum mechanics. A modern Development / Ballentine L. E. Singapore: World Scientific Publishing, 1998. 658 с.
- [10] Оптический резонанс и двухуровневые атомы / Аллен Л., Эберли Дж. М: Мир 1978. 222 с.
- [11] Exactly Solvable Problems of Atom Interaction with External Electromagnetic Field, Chapter 2 in Quantum optics of Light Scattering / Lisiansky A. A., Andrianov Ev. S., Vinogradov A. P., Shishkov V. Yu., Cham, Switzerland: Springer Nature Switzerland AG, 2024. 305 с.
- [12] Квантовая теория света / Р. Лоудон. Мир, Москва 1976. 488 с.

CAN FLOQUET'S THEORY SERVE AS A FOUNDATION FOR THE APPLICATION OF VIRTUAL LEVELS IN THE RAMAN EFFECT?

A.P. Vinogradov^{*1,2}, E.S. Andrianov^{1,2}

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

² Dukhov Research Institute of Automatics (VNIIA), Moscow, Russia

* a-vinogr@yandex.ru

Abstract

In many monographs, Raman scattering (RS) is still explained as a two-stage process. At the first stage, the quantum of incident radiation is absorbed and the molecule goes into an excited state. At the second stage, a photon is emitted with a frequency different from the frequency of the incident photon. Since the levels necessary for the absorption of a photon are usually not present in a molecule, they are replaced by virtual levels. However, there is no justification for the existence of virtual levels today. There are vague statements that when interacting with an external field, the spectrum of the molecule is rebuilt, and such levels arise. In the case of illumination of a two-level system (TLS) by a harmonic external field the Hamiltonian of the system periodically depends on time, which makes it possible to use the Floquet theory, which predicts the appearance in the problem of Floquet frequencies that is close to the frequency of the incident field. It is shown that this approach does not lead to the appearance of the desired level. The dynamics of the system are reduced to the known Rabi oscillations, and the Floquet frequencies are not included in the final answer.

Key words: Raman scattering, virtual levels, the Floquet theorem