

Том 167, Выпуск 1

ISSN 0044-4510

Январь 2025



**ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ**



НАУКА

— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

*Продолжение физической части
Журнала Русского физико-химического общества,
издававшегося с 1873 по 1930 г.*

Выходит 12 раз в год

Том 167

ЯНВАРЬ

ВЫПУСК 1

МОСКВА

2025

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР А. И. СМИРНОВ

ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

Е. И. КАЦ, С. В. ТРОИЦКИЙ, И. А. ФОМИН

Редколлегия: член-корр. РАН А. И. СМИРНОВ,

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,

д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),

д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ,

д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ,

канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),

д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора)

Редакционный совет:

член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Москва

ФГБУ «ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

О временах жизни квазистационарных уровней при туннелировании в резонансно-туннельной структуре	Давидович М. В., Нефедов И. С.	5
Индукцированные ВУФ-импульсом каналы генерации излучения атомом в интенсивном лазерном ИК-поле	Бреев Я. В., Минина А. А., Флегель А. В., Фролов М. В.	27

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Отскок в неминимальной эффективной модели скалярно-тензорной гравитации	Алексеев С. О., Немтинова А. В., Зенин О. И., Байдерин А. А.	45
Spinor Field in FLRW Cosmology: Spherically Symmetric Case	Saha B.	49
Квантовые модели электрона с нулевой собственной энергией	Незнамов В. П., Шемарулин В. Е.	59

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Каналирование нейтронов в магнитном плоском волноводе	Кожевников С. В., Хайдуков Ю. Н.	66
Диаэластический эффект в алюминии после воздействия наносекундными лазерными импульсами ультрафиолетового диапазона	Афонин Г. В., Железнов В. Ю., Малинский Т. В., Миколуцкий С. И., Рогалин В. Е., Хомич Ю. В., Кобелев Н. П., Хоник В. А.	79

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Двумерные магнитоплазмы в полосе конечной ширины	Витлина Р. З., Магарилл Л. И., Чаплик А. В.	87
Квантовый $SU(3)$ -ферримagnetик на треугольной решетке в магнитном поле	Мартынов А. С., Дзедзисашвили Д. М.	95
Стационарный и нестационарный ток в конечных цепочках Китаева	Билинский Ю. М., Арсеев П. И., Маслова Н. С.	115

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА,
ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ**

Suprathermal Electron Transport in Weakly and Strongly Magnetized Astrophysical Plasmas Including Coulomb Collisional Effects	Ha Ji-Hoon	129
Резонансные волноводные потери люминесценции в слое жидкого кристалла, ограниченного ИТО-электродами . .	Палто С. П., Рыбаков Д. О., Гейвандов А. Р., Касьянова И. В.	141

О ВРЕМЕНАХ ЖИЗНИ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ В РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ

М. В. Давидович^{a,}, И. С. Нефедов^{a,b}*

^a Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского
410012, Саратов, Россия

^b Российский университет Дружбы народов
117198, Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 марта 2024 г.,
после переработки 8 марта 2024 г.
Принята к публикации 28 марта 2024 г.

Мы исследуем полевую эмиссию в резонансно-туннельных гетероструктурах с одной квантовой ямой и двумя барьерами, а также влияние на нее времен жизни резонансных метастабильных уровней, образующихся в яме. Также рассмотрена задача о времени туннелирования квантовой частицы (электрона) через структуру с барьером и двумя барьерами и ямой. Используются стационарное и нестационарное уравнения Шредингера. Время установления процесса туннелирования всегда конечно, но может быть меньше времени пролета структуры частицей со скоростью Ферми. Определены времена жизни метастабильных уровней и исследовано их влияние на туннельный ток. Он возрастает при увеличении ширины ям и выравнивании высот барьеров.

DOI: 10.31857/S0044451025010018

1. ВВЕДЕНИЕ

Резонансно-туннельные структуры (РТС), представляющие собой наноразмерные гетероструктуры с полевой эмиссией, широко используются в электронике как источники весьма высоких плотностей тока (до 10^{14} А/м²) [1–3]. Они также являются основой при проектировании резонансно-туннельных диодов (РТД), транзисторов, квантово-каскадных лазеров (ККЛ) типа «штарковской лестницы», ТГЧ транзисторов и переключателей [4–11], а также других устройств. Для всех них важны времена переключения, срабатывания и вообще времена переходных процессов [11,12]. РТС характеризуется тем, что имеет одну, две или несколько квантовых ям, разделенных барьерами, в которых могут возникать квазистационарные резонансные уровни [13]. Будем называть имитирующий электроны левый электрод катодом (и обозначать все относящиеся к нему величины индексом c), а правый — анодом (индекс

a). Для промежуточного электрода (сетки) используем индекс g . В случае одинаковых электрохимических потенциалов электродов $\mu_c = \mu_a$ квантовый потенциал $V(x)$ между двумя электродами (в диодной структуре) похож на перевернутую параболу на постаменте, и может быть строго описан бесконечным рядом изображений, в котором учтены работы выхода электронов [1]. Аппроксимация этого ряда перевернутой параболой весьма грубая [1,14]. Более точна аппроксимация перевернутой параболой четвертого порядка [1,2]. Мы будем использовать еще более точную аппроксимацию для потенциала в диоде $0 < x < d$ с анодным напряжением U_a :

$$V(x) = E_{Fc} + W_c \frac{(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \varepsilon} \times \left[1 - \frac{\delta d}{(x + \delta(1 - x/d))(d - x + x\delta/d)} \right] - \frac{eU_a x}{d}. \quad (1)$$

В этой формуле $\alpha = \delta(2 \ln(2) + 1)$, работы выхода (РВ) катода и анода считаются одинаковыми

* E-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

$W_c = W_a$ и связаны с параметром (размером) δ формулой

$$W_a = e^2 / (16\pi\epsilon_0\delta).$$

Также для упрощения далее считаем одинаковыми энергии Ферми (ЭФ) $E_{Fc} = E_{Fa}$ электродов. Для потенциала (1) на катоде $V(0) = E_{Fa}$, а на аноде

$$V(d) = E_{Fa} - eU_a = \mu_a,$$

т.е. квантовый потенциал V совпадает с электрохимическими потенциалами. В случае разных РВ (и материалов катода и анода) надо в (1) добавить член $(E_{Fa} - E_{Fc})x/d$. Точность формулы (1) не хуже 1%. Диодная структура не позволяет получать очень большие плотности тока. Увеличение тока происходит за счет резонансного туннелирования (РТ), когда имеется одна или несколько квантовых ям, окруженных барьерами [1–3]. Отражения от барьеров интерферируют, и полный коэффициент отражения погашается. Далее для упрощения рассматриваем одноямную структуру с тремя электродами: катодом (исток), сеткой (затвором) и анодом (сток). Формула (1) применима как к вакуумному промежутку ($\epsilon=1$), так и к диэлектрическому промежутку между электродами. При отсутствии анодного напряжения $U_a = 0$ она дает в центре промежутка значение

$$V(d/2) = E_{Fc} + \frac{W_c(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \epsilon}.$$

РВ 3.6 эВ соответствует величина $\delta = 0.1$ нм, поэтому в обычном диапазоне РВ веществ 2–5 эВ и обычных размерах электродов и зазоров РТС порядка нм имеют место неравенства $\delta/d \ll 1$, $\alpha/d \ll 1$, при этом в отсутствии анодного напряжения $V(d/2) \approx E_{Fc} + W_c/\epsilon$. Диэлектрик с диэлектрической проницаемостью (ДП) ϵ снижает барьер в ϵ раз.

Хорошими и удобными диэлектриками для РТС является CVD (Chemical Vapor Deposition) алмаз ($\epsilon = 5.6$, ширина запрещенной зоны 2.5 эВ) [15] и окись бериллия BeO ($\epsilon = 6.7$, ширина запрещенной зоны 10.6 эВ). Эти диэлектрики сильно снижают барьер и обладают самой высокой теплопроводностью, что важно при высоких плотностях тока [2,3]. Хотя плотность CVD алмаза с 88% sp^3 -гибридизацией составляет 88.2 % от плотности кристаллического алмаза, его ДП можно брать такой же 5.6 из-за наличия небольшой графитовой фазы. Для электродов можно использовать металлы и легированные полупроводники. Наибольшей ЭФ обладает бериллий 14.6 эВ. Кроме того, он имеет относительно низкую

РВ 3.92 эВ, и самую высокую из металлов теплопроводность. Для построения сложного профиля V рис. 1 формулу (1) используем дважды, применяя к промежутку катод-сетка (заменяя $U_a \rightarrow U_g$) и к промежутку сетка-анод, полагая в (1) $E_{Fc} \rightarrow E_{Fc} - eU_g$. На сетке квантовый потенциал постоянный и определяется ее электростатическим потенциалом U_g . В РТД и ККЛ обычно хорошо проводящие слои выполняют электрически свободными, т.е. потенциал вдоль них не фиксирован и спадает [4–12]. На рис. 1 изображены типичные профили $V(x)$ диодных и триодных структур при разных анодных U_a и сеточных U_g напряжениях для медных электродов. Для образования ямы взято $U_g = E_{Fc}/e$. Энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости катода. Оно в данном случае совпадает с дном ямы. Если в образованной квантовой яме существует уровень энергии E_n , то он квазистационарный, поскольку как на катоде, так и на аноде всегда есть точно такой же уровень, и электрон из ямы может на него перейти. Возможно туннелирование как влево на катод, так и вправо на анод. Далее с этого уровня электрон переходит на уровень Ферми (УФ) соответствующего электрода. Такой электрон далее может попасть в источник питания, поскольку только электроны вблизи УФ участвуют в переносе диффузионного тока проводимости.

Вопросу времени жизни (распада) квазистационарного уровня в сферически симметричной квантовой яме посвящено несколько работ, например, [16–18]. Время жизни квазистационарных уровней РТС в одномерном декартовом рассмотрении строго не исследовалось. Это время тесно связано с вопросом о времени туннелирования одиночной частицы через структуру (временем ее пребывания в ней). Вопросам введения различных подобных времен посвящена обширная литература (см., например, список литературы в работе [19]). Относительно времен туннелирования до сих пор идет дискуссия. Имеет место ряд парадоксов. Времена туннелирования тесно связаны с временами срабатывания туннельных приборов [11]. Обычно РТД, ККЛ и другие РТС моделируют, используя прямоугольные потенциалы, измененные членом $-eU_ax/d$ [11], что является грубым приближением, поскольку большие напряжения приводят к форме барьера близкой к треугольнику, поставленному на постамент [1]. Расчет на основе уравнения Шредингера (УШ) показывает, что прозрачность такого барьера на порядки лучше, чем прямоугольного той же высоты и с тем же основанием. Часто используют квазиклассическое приближение [16], которое для треуголь-

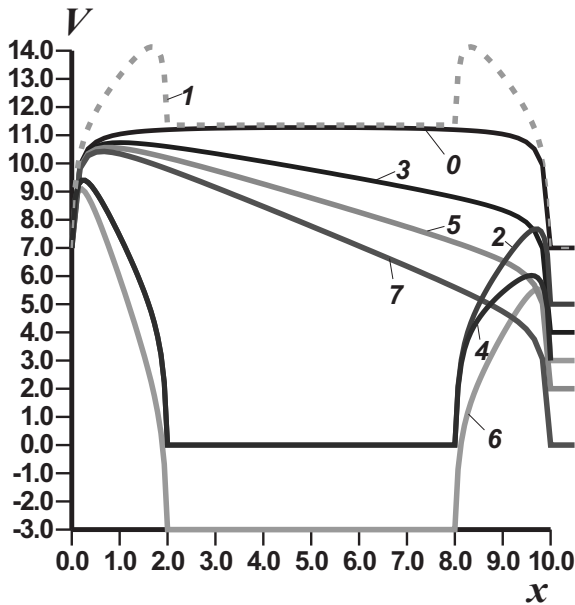


Рис. 1. Форма потенциального барьера V (эВ) в зависимости от расстояния x (нм) в вакуумном диоде (кривые 0, 3, 5, 7) и в вакуумном триоде (1, 2, 4, 6). Номер кривых для диода соответствует анодному напряжению U_a в В. Для триодных кривых 2, 4 напряжение на сетке $U_g = E_{Fc}/e$, а их номер соответствует анодному напряжению. Для кривой 1 $U_a = 0$, $U_g = W_c/e$. Для кривой 6 $U_a = 4$ В, $U_g = 3$ В. $E_{Fc} = 7$ эВ, $W_c = 4.36$ эВ (медные электроды)

ного барьера точно интегрируется [20]. Однако оно определено с точностью до предэкспоненциального множителя и весьма неточное в верхней узкой части барьера, поскольку для его получения отброшена обратная электронная волна [20]. Для узкого барьера эта волна вносит существенный вклад. При анализе РТС на основе двух и более прямоугольных барьеров обычно резонансные уровни определяют как проникновение частицы через одинаковые барьеры влево или вправо с той же энергией, что и в яме [13]. В реальных РТС это не так. Попадая на катод или анод с некой энергией, частица переходит на УФ электрода, отдавая или поглощая квант энергии, и далее уходит от структуры с этой энергией, поскольку любой ток в проводниках создается электронами на УФ. При стационарном туннелировании (постоянном напряжении на аноде) число туннелирующих с катода электронов экспоненциально больше, чем число туннелирующих с анода, и получаем постоянный эмиссионный ток, замыкающийся через источник питания. Возникновение резонансных уровней E'_n приводит к резонансному туннелированию (РТ), сопровождающемуся усилением тока, поскольку для электронов с энергией $E = E'_n$ барьер

полностью прозрачный. Квазистационарные уровни возникают с увеличением ширины ямы. Эти уровни энергии комплексные: $\tilde{E}_n = E'_n - iE''_n$. Величина E''_n определяет время жизни уровня $\tau_n = 2\hbar/E''_n$. Чем оно меньше, тем более уширяется уровень, тем большая область энергий соответствует условию $E \approx E'_n$, и тем больше электронов резонансно туннелируют. Поэтому важным является определение времен жизни (комплексных энергий \tilde{E}_n) квазистационарных уровней и влияние на них конфигураций квантового потенциала, что является целью работы. При полевой эмиссии число набегающих в секунду на барьер электронов в интервале скоростей v_z , $v_z + dv_z$ будет

$$d\nu(v_z) = n^+(k) v_z dv_z,$$

где

$$n^+(k) = \frac{m_e^2 k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \times \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_{Fc} - E(k)}{k_B T} \right) \right) v_z. \quad (2)$$

Формула (2) получается усреднением по всем поперечным скоростям Ферми-газа электронов металлического катода и приведена для конечной температуры. При холодной эмиссии ($T=0$) спектр ограничен Φ :

$$n^+(k) = m_e^2 (E_{Fc} - E(k)) / (2\pi^2 \hbar^3) v_z.$$

Хотя реально туннелирует многоскоростной поток электронов, и он определяет полную туннельную плотность тока

$$J^+(U_a) = \frac{-em_e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\mu_c} D^+(E, U_a) (\mu_c - E) dE, \quad (3)$$

задачу можно рассматривать как одночастичное туннелирование электронов с заданной энергией E . Заряд электрона взят как $q_e = -e$, поэтому положительный поток электронов с катода приводит к положительному анодному току $-J^+(U_a)$ через единичное сечение. Верхний предел в (3) порядка нескольких эВ, что вполне соответствует нерелятивистской квантовой механике. При термополевой эмиссии (температуры $T \sim 2000$ К) следует использовать (2), и верхний предел в (3) из-за сильного убывания логарифма достаточно увеличить на несколько эВ. Далее рассматриваем случай $T=0$. Полная плотность тока $J = J^+ - J^-$ определяется туннелированием в обоих направлениях с коэффициентами туннелирования (прозрачности) $D^\pm(E) = 1 - |R^\pm|^2$,

которые определяются на основе вычисления коэффициентов отражения R^\pm . Для определения R^\pm решаем УШ. Формула для J^- получается заменой $\mu_c \rightarrow \mu_a$, $D^+ \rightarrow D^-$. Для симметричного потенциала ($U_a=0$) всегда $D^+ = D^-$. Для слабо несимметричного потенциала $D^+ \approx D^-$, причем слабое отличие наблюдается при малых энергиях.

2. ВРЕМЯ ЖИЗНИ УРОВНЯ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УШ

Стационарное УШ

$$\left(-\frac{(\hbar \partial_x)^2}{2m_e} + V(x) \right) \psi(x) = 0$$

для потенциала $V(x)$ удобнее всего решать методом трансформации волнового импеданса. При постоянном в области $x_n < x < x_{n+1}$ потенциале V_n волновой импеданс вводим как

$$z_n(E) = -i\psi(x)/\psi'(x) = 1/k_n,$$

где

$$\psi(x) = A \exp(ik_n x)$$

— волновая функция (ВФ) движущегося в направлении x электрона,

$$k_n = \sqrt{2m_e(E - V_n)}/\hbar.$$

Пусть $z_0(x_{n+1})$ — импеданс справа. Он трансформируется во входной импеданс слева по формуле

$$Z_i(x_n) = z_n \frac{z_0 - iz_n \operatorname{tg}(k_n(x_{n+1} - x_n))}{z_n - iz_0 \operatorname{tg}(k_n(x_{n+1} - x_n))}. \quad (4)$$

Полагая $z_0 = Z_i(x_n)$, снова применяем указанную формулу для другого участка, пока не получим входной импеданс на катоде $Z_{ic}(0)$ и коэффициент отражения со стороны катода

$$R^+ = (1 - k_0 Z_{ic}(0)) / (1 + k_0 Z_{ic}(0)).$$

Здесь

$$k_0 = k_c = \sqrt{2m_e E}/\hbar.$$

Для начала итераций на аноде берем

$$k_a = \sqrt{2m_e(E - E_{Fc} + eU_a)}/\hbar,$$

$$z_0 = 1/k_a.$$

Следует отметить, что обычно при туннелировании через барьер берут $k_a = k_0$, т.е. рассматривают

движение до точки поворота. Такие прозрачности равны $\tilde{D}^+ = \tilde{D}^-$. Но после прохождения этой точки электрон движется квазиклассически, приобретая энергию eU_a . Это приводит к опусканию УФ на аноде на eU_a и к необходимости использования величины k_a . Указанное иллюстрирует бесконечно узкий барьер в виде ступеньки: $V = 0$ на катоде при $x < 0$ и $V = -eU_a$ при $x > 0$ на аноде. Для него квазиклассическое приближение дает полную прозрачность $D = 1$, $R = 0$. Однако при строгом решении отражение от ступеньки есть

$$R = (k_0 - k_a) / (k_0 + k_a)$$

и $D < 1$. Применение формулы (4) эквивалентно сшиванию ВФ и ее производной. Очевидно, уровни

$$E_n = E'_n - iE''_n$$

можно определить как комплексные корни уравнения

$$R^+(E_n) = 0.$$

Прозрачность с анода на катод D^- определяется обратным пересчетом, при этом на аноде следует взять

$$k_a = \sqrt{2m_e E}/\hbar,$$

$$z_0 = 1/k_a$$

и

$$R^- = (1 - k_0 Z_{ia}(d)) / (1 + k_0 Z_{ia}(d)).$$

Отличие D^+ и D^- тем больше, чем больше U_a . При $eU_a > E_{Fc}$ туннелирование с анода невозможно. После туннелирования электрон всегда переходит на УФ соответствующего электрода, отдавая ему или забирая у него энергию $e|E - E_{F(a,c)}|$ в зависимости от знака разности. Этот процесс диффузионный. Он происходит на длине порядка длины свободного пробега и не влияет на волновой процесс туннелирования. При туннелировании с уровня ниже УФ происходит нагрев соответствующего электрода (эффект Ноттингема): уходящий электрон замещается электроном с УФ. При $U_a = 0$ имеем симметричную структуру в виде ямы между двумя барьерами (рис. 1, кривые θ , 1). В этом случае условие

$$R^+(E_n) = R^-(E_n) = 0$$

приводит к уровням, с которых частица одинаково туннелирует влево или вправо. В противном случае условие $R^+(E_n) = 0$ дает уровни, с которых частица может уйти на анод, а условие $R^-(E_n) = 0$ соответствует уровням перехода на катод. Вычисления

показывают, что уровни примерно совпадают в пределах их ширины. Пусть, например, $eU_a > E_{FA}$. Все уровни энергии на аноде становятся отрицательными, и с них невозможны переходы на положительные уровни энергии катода. Нетрудно видеть, что для $E < 0$ в этом случае $|R^-(E)| \equiv 1$, т.е. нет решений уравнения $R^-(E) = 0$. В этом случае импеданс катода $1/k_c$ мнимый, и катод для анода выступает как бесконечно длинная полностью отражающая ступенька. Положительными энергии на аноде могут быть только при ненулевой температуре, т.е. при термоэмиссии. Решения уравнения $R^+(E) = 0$ всегда существуют для уровней на катоде. Таким образом, для несимметричного потенциала существуют два типа уровней. Реально РТ рассматривается для несимметричных потенциалов, поскольку только в этом случае существует полный ток.

Другой возможный подход к решению стационарного УШ может состоять в использовании матриц переноса [1–3] $\hat{T}(E)$. Матрица структуры определяется путем кусочно-постоянной аппроксимации потенциала V и перемножения матриц участков. Характеристическое уравнение для определения уровней туннелирования на анод принимает вид [1, 3]

$$ik_c(E) = \frac{T_{21}(E) - ik_a(E)T_{22}(E)}{T_{11}(E) - ik_a(E)T_{12}(E)}. \quad (5)$$

Еще один способ решения УШ состоит в использовании метода прогонки. Кроме нахождения $R^\pm(E)$ и $D^\pm(E)$ он позволяет определить амплитуды $A_n^\pm \psi(\pm ik_n(x - x_n))$ у волновых функций и распределение заряда в области барьера и ямы при известном входном потоке падающих частиц с катода $n^+(k) v_z dv_z$ и с анода $n^-(k) v_z dv_z$. Это, в свою очередь, позволяет оценить изменение квантового потенциала V за счет влияния пространственного заряда при сильном токе [2]. Такая оценка требует совместного итерационного решения уравнения Пуассона (УП) и УШ. Для наших целей анализа влияния резонансных уровней на эмиссию вышеупомянутые численные методы не удобны.

Получим строгое решение УШ для модельного потенциала $\hat{V}(x)$, описываемого двумя прямоугольными барьерами высоты V_c у катода и V_a у анода рис. 2. Для лучшего соответствия реальному потенциалу размеры барьеров t_c и t_a берем примерно в два раза меньше, чем основания реальных почти треугольных барьеров на прямоугольном постаменте (рис. 1, кривые 2, 4, 6), при этом размер ямы t_w соответственно увеличиваем. Можно получить строгое соответствие ширины треугольного

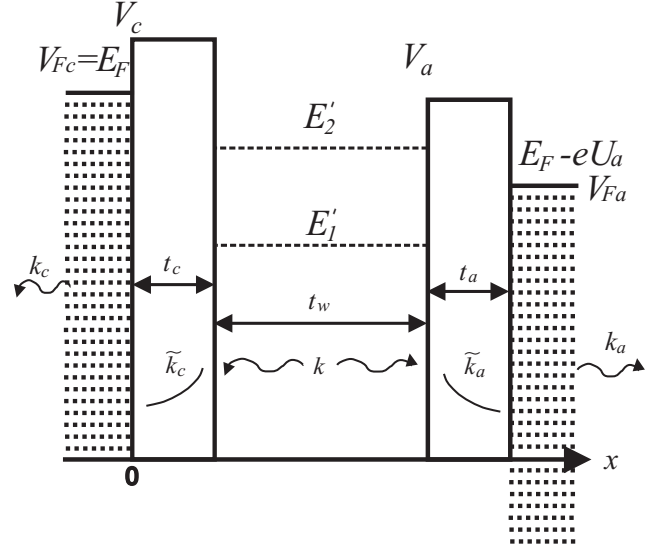


Рис. 2. Схематическое распределение потенциала V в однояменной РТС при $U_g = E_F/e$. Штриховыми линиями обозначены уровни на катоде, аноде и два метастабильных уровня

барьера и ширины прямоугольного барьера с одинаковыми высотами, приравнивая их прозрачности $D_{rec}(E) = D_{tre}(E)$. Такое соответствие зависит от энергии. Усредняя по энергиям, получим коэффициент примерно $t_{rec} \approx 0.5 t_{tre}$. В яме решение УШ имеет вид

$$\psi(x) = A_w^+ \exp(ik_0(x - t_c)) + A_w^- \exp(-ik_0(x - t_c)).$$

В барьере у катода имеем ВФ

$$\psi(x) = A_c^+ \exp(-\tilde{k}_A x) + A_c^- \exp(\tilde{k}_A x),$$

а в барьере у анода ВФ принимает вид

$$\psi(x) = A_a^+ \exp(-\tilde{k}_a(x - t_c - t_w)) + A_a^- \exp(\tilde{k}_a(x - t_c - t_w)).$$

Здесь обозначено

$$\tilde{k}_c = \sqrt{2m_e(V_c - E)},$$

$$\tilde{k}_a = \sqrt{2m_e(V_a - E)},$$

$$k_0 = \sqrt{2m_e E}.$$

ВФ на катоде есть уходящая от него волна

$$\psi(x) = A_c \exp(-ik_0 x).$$

Аналогично на аноде

$$\psi(x) = A_a \exp(ik_0(x - d)).$$

Здесь $A_a = k_0$, $d = t_c + t_w + t_a$ — размер структуры. Задача, как обычно, состоит в спивании ВФ и их производных. Всего неизвестных восемь, границ четыре, и условий тоже восемь. Вычислять определитель восьмого порядка без использования численных методов — задача не из легких. Будем последовательно исключать неизвестные. Результаты такого исключения приведены в Приложении. Определяя функцию $f(E)$ по формуле (П2) Приложения, имеем характеристическое уравнение

$$E = V_a \frac{(f(E) - 1)^2}{(f(E) - 1)^2 - (f(E) + 1)^2}. \quad (6)$$

для итерационного поиска комплексных корней \tilde{E}_n . Считая функцию f большой по модулю (барьеры широкими), получим $E \approx -V_c f(E)/4$. При расширении ямы от весьма узкой сначала уровень возникает около V_a [21]. Для такого уровня $\tilde{k}_a \approx 0$. В этом случае должно быть

$$\operatorname{tg}(k_0 t_w) \approx k_0 / \tilde{k}_a.$$

Пусть имеется такой уровень

$$\tilde{E}_1 = V_a (1 - \delta_1),$$

где δ_1 — малая величина. Пусть также

$$\delta \ll \Delta = V_c / V_a - 1.$$

Вычислим функцию f . Имеем

$$\begin{aligned} \tilde{k}_c &\approx \tilde{k} (1 + \delta / (2\Delta)), \\ \exp(2\tilde{k}_c t_c) &\approx \exp(2\tilde{k} t_c) (1 + \delta / (2\Delta)), \end{aligned}$$

где обозначена величина

$$\tilde{k} = \sqrt{2m_e V_a \Delta} / \hbar.$$

Также

$$k_0 \approx \tilde{k} (1 - \delta/2) / \sqrt{\Delta},$$

$$k_0 / \tilde{k}_c \approx (1 - \delta_1 (1 + 1/\Delta) / 2 + \delta_1^2 / (4\Delta)) / \sqrt{\Delta}.$$

Положим $\tilde{k}_a = 0$, а введенное условие запишем в виде

$$\operatorname{tg}(t_w \tilde{k} / \sqrt{\Delta}) = \sqrt{\Delta}.$$

Тогда имеем

$$f \approx \frac{\exp(2\tilde{k} t_c)}{4\Delta - \delta_1 (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k})} \times$$

$$\begin{aligned} &\times \left\{ \delta_1 (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k}) - \right. \\ &\left. - (\delta_1^2 / 2) \left[\Delta + 2\Delta (t_w \tilde{k})^2 + (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k}) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Для левой части (П2) получим

$$\frac{1 + ik_0 / \tilde{k}_a}{1 - ik_0 / \tilde{k}_a} \approx 1 + \delta_1 \frac{1 + i\sqrt{\Delta}}{(\Delta + 1)^2},$$

откуда можно найти поправку δ_1 . Пренебрегая вторым порядком, найдем

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \frac{16 \exp(-2\tilde{k} t_c)}{(1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k})} + \\ &+ \frac{4\delta \exp(-2\tilde{k} t_c)}{(1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k})} \times \\ &\times \left[4 \frac{1 + i\sqrt{\Delta}}{(\Delta + 1)^2} - (1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k}) \right]. \end{aligned}$$

Второй член можно опустить. Для точного поиска корней уравнения (6) рассмотрим яму, окруженную бесконечно широкими барьерами, т.е. ступеньками потенциала высоты V_c и V_a . Пусть $V_a < V_c$. В такой яме возможны стационарные уровни энергии $E_n < V_a$. Задача о несимметричной яме решена и исследована в [21]. С обозначением

$$k_{0n} = \sqrt{2m_e E_n} / \hbar$$

она имеет решение

$$\begin{aligned} k_{0n} t_w &= n\pi - \arcsin\left(\frac{k_{0n} \hbar}{\sqrt{2m_e V_c}}\right) - \\ &- \arcsin\left(\frac{k_{0n} \hbar}{\sqrt{2m_e V_a}}\right) = g(E_n) \quad (7) \end{aligned}$$

и дает действительные уровни. Уравнение (7) запишем в виде

$$\operatorname{tg}(k_{0n} t_w) = k_{0n} t_n,$$

где

$$t_n = \frac{k_{0n} + \tilde{k}_c}{\tilde{k}_c \tilde{k}_a - k_{0n}^2}.$$

Выбирая ширину ямы из условия существования одного уровня

$$t_w > t_0 = \frac{\pi/2 - \arcsin(V_a/V_c)}{\sqrt{2m_e V_c} / \hbar},$$

имеем

$$E_n = \frac{(\hbar g(E_n)/t_w)^2}{2m_e}.$$

Из этого уравнения методом деления пополам на отрезке $(0, V_0)$ находим действительные значения E_1 . Для существования нескольких уровней яма должна быть в несколько раз шире, чем t_0 . Тогда находим E_n , $n = 1, 2, \dots, N$. Значения E_n используем как начальные $\tilde{E}_n^{(0)} = E_n$ для итераций по формуле (6). В результате получаем все уровни, с которых частица может уйти как на анод, так и на катод. Для повышения тока следует использовать максимально широкую яму, для чего материал соответствующего электрода должен обладать максимально большой длиной свободного пробега (ДСП) электронов. Кратно увеличить ДСП можно, используя криогенные температуры. Рассмотрим вывод уравнения (7), когда ВФ со стороны катода и анода взяты в виде

$$\psi(x) = A_c \exp\left(\tilde{k}_a(1 - i\delta_c)x\right),$$

$$\psi(x) = A_a \exp\left(-\tilde{k}_a(1 - i\delta_a)(x - t_w)\right),$$

т. е. барьеры частично прозрачные. Здесь

$$\tilde{k}_c = \sqrt{2m_e(V_c - E'_n)}/\hbar,$$

$$\tilde{k}_a = \sqrt{2m_e(V_a - E'_n)}/\hbar,$$

а малые поправки берем в виде

$$\delta_c = E''_n / (2V_c - 2E'_n),$$

$$\delta_a = E''_n / (2V_a - 2E'_n).$$

Реально они связаны с конечной шириной барьеров и конечным временем жизни уровней. В яме $0 < x < t_w$ берем

$$\psi(x) = A \sin(k_{0n}(1 + \delta_n)x + \delta),$$

где

$$\tilde{E}_n = (1 + \delta_n)^2 (k_{0n}\hbar)^2 / (2m_e),$$

а малую поправку δ_n требуется найти. В результате для нее получаем характеристическое уравнение

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(k_{0n}(1 + \delta_n)t_w) &= k_{0n}(1 + \delta_n) \times \\ &\times \frac{\tilde{k}_a(1 - i\delta_a) + \tilde{k}_c(1 - i\delta_c)}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a(1 - i\delta_a)(1 - i\delta_c) - k_{0n}^2(1 + \delta_n)^2}. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\delta'_{an} = \delta_a/\delta_n, \quad \delta'_{cn} = \delta_c/\delta_n.$$

Штрихованные величины не являются малыми. Учитывая (8), для получения поправки следует использовать разложение вплоть до второго порядка по δ_n^2 . Получаем $\delta_n = A_n/B_n$, где

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{t_w}{t_n} + k_{0n}^2 t_n t_w - 1 + \frac{i(\delta'_{an}\tilde{k}_a + \delta'_{cn}\tilde{k}_c)}{\tilde{k}_a + \tilde{k}_c} - \\ &- \frac{2i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + 2k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2}, \\ B_n &= \frac{\tilde{k}_c\tilde{k}_a\delta'_{an}\delta'_{cn} + k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2} - k_{0n}^2 t_n t_w + \\ &+ 4 \left[\frac{i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2} \right]^2 + \\ &+ \frac{2i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + 2k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2}. \end{aligned}$$

При вычислении поправки можно полагать $\tilde{E}'_n = E_n$, и тогда

$$\tilde{E}''_n/E_n = -\operatorname{Im}(\delta_n),$$

а реальная часть также изменяется:

$$E'_n = E_n(1 + \operatorname{Re}(\delta_n)).$$

На рис. 2 показаны два уровня. С катода возможно туннелирование на оба уровня с уходом на анод. При этом катод нагревается, поскольку его уровень выше УФ (эффект Ноттингема). При переходе с первого уровня на анод последний охлаждается, а при переходе со второго — нагревается. Туннелирование с анода на второй уровень при $T=0$ невозможно. Время жизни уровня экспоненциально уменьшается с уменьшением ширин барьеров. Последние уменьшаются с ростом U_g (эффект Шоттки), т. е. с увеличением глубины ямы. При $U_g > U_a + E_{Fc}/\hbar$ в яме возможны стационарные уровни. Сужает барьеры увеличение напряжения U_g и уменьшение размеров t_c и t_a . Имеет место критическое напряжение, когда барьер относительно УФ исчезает, т. е. становится почти треугольным. Действительно, используя формулу (1), в которой обозначаем

$$W' = W_c \frac{(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \varepsilon},$$

считая $d = t_g$ и пренебрегая в ней малыми членами, это условие можно записать так:

$$V(x_0) = E_{Fc} =$$

$$= E_{Fc} + W'_c(1 - \delta d / (x_0(d - x_0))) - eU_g x_0 / d.$$

Из него находим точку x_0 , где это имеет место. Она весьма близка к катоду, поэтому упрощаем кубическое уравнение, заменяя $d - x_0$ на d :

$$x_0 = eU_g x_0^2 / (W'_c d) + \delta.$$

Решить это квадратное уравнение проще итерациями, полагая сначала $x_0 = \delta$, а затем уточняя:

$$x_0 = \delta + \delta^2 eU_g / (W'_c d).$$

Уточнение весьма мало, поэтому получаем критическое напряжение

$$U_g = W'(d/\delta - 1) / (2e) \approx W'd / (2e\delta).$$

Для РВ порядка 4 эВ при $d=2$ нм ему соответствует напряженность критического электрического поля на катоде $2.35 \cdot 10^{10}$ В/м. Таким образом, в РТС с ямой с шириной порядка нескольких t_0 при малых ширинах барьеров t_c и t_a возможно сильное увеличение эмиссионного тока, для чего достаточно увеличить размер t_w . Однако туннелирование — транспорт баллистический без потери энергии, поэтому ширина t_w должна быть существенно меньше ДСП электрона в соответствующем материале. Характерный размер t_w при комнатной температуре — несколько нм. Для уменьшения времени жизни уровней с целью увеличения тока барьеры следует выполнять узкими. Их сужение также достигается увеличением напряжений на электродах. Получить точные решения уравнения (6) не сложно, но эти уравнения модельные, поэтому для реальных потенциалов рис. 1 следует решать строгие уравнения (5) или $R^\pm(E) = 0$. В таблице приведены результаты итерационного вычисления комплексных энергий. Вычисления по формуле (5) и из условий $R^\pm(E) = 0$ совпадают.

Весьма простым методом определения комплексных уровней является расчет прозрачности структур. На рис. 3 приведен пример вычисления D^+ и в ряде двухъямных РТС, имеющих от 2 до 4 метастабильных уровней. Такие структуры получаются при сдвоенной сетке [1–3] и более удобны для получения РТ, поскольку можно сформировать два примерно одинаковых барьера при существенном электростатическом потенциале U_a . Отметим, что пики для D^+ и D^- , вообще говоря, немного различаются, причем в приведенных случаях различие имеет место при малых энергиях после нескольких знаков от запятой. При $E > E_{Fc}$ всегда $D^\pm \approx 1$. Этот случай соответствует термоэмиссии, если температуры

электродов $T^\pm > 0$. Отметим, что при разных барьерах могут быть пики, не доходящие до единицы (неполное РТ). Это связано с неполным погашением отраженных электронных волн. Величины E'_n определяются по максимумам пиков, что можно сделать достаточно точно. Величины E''_n определяются по ширине резонансов. Обычно уровни расположены вблизи верхних областей ямы.

Рассмотрим, как влияет положение уровня и его ширина на вклад в ток. Пусть имеется один уровень $E'_1 - iE''_1$. Аппроксимируя его в (3) равнобедренным треугольником единичной высоты, получаем вклад от уровня

$$\Delta J^+ = -em_e(E_{Fc} - E'_1)E''_1 / (4\pi^2\hbar^3).$$

Для уровней вблизи УФ катода он мал. Поэтому важно получать низколежащие уровни с малым временем жизни (большой шириной). Для одиночного треугольного потенциального барьера при закритическом поле квазиклассическое приближение дает его прозрачность D в виде

$$D \approx \exp\left(-4d\sqrt{2m_e}W^{3/2}/3\hbar eU_a\right),$$

см. [20]. Здесь высота барьера W отсчитывается от кинетической энергии набегающего на барьер электрона, т. е. в нашем случае $W = V - E$. Для глубоких

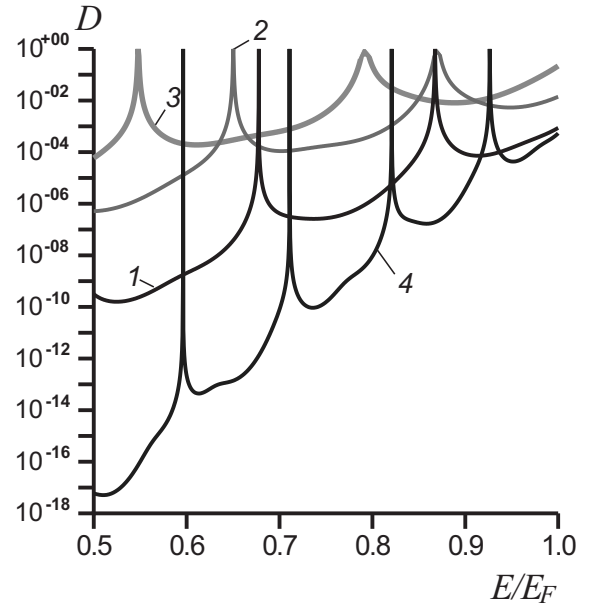


Рис. 3. Коэффициент туннелирования с катода $D = D^+$ в двухъямной структуре $t = t_1 = t_2 = t_3$ в зависимости от отношения E/E_{Fc} при $t = t_g = 1$ нм, $d = 5$ нм (1, 3) и $t = 2$ нм, $t_g = 1.5$ нм, $d = 9$ нм (4). Работы выхода $W_c = W_g = W_a = 4.0$ эВ, энергии Ферми $E_{Fc} = E_{Fa} = 5$ эВ, $U_a = 11$ В. $U_g = 13$ В (1, 4); $U_g = 20$ В (2); $U_g = 25$ В (3)

Таблица. Метастабильные уровни (эВ) в области $(0, E_{Ec})$ для потенциала рис. 1 при разных анодных напряжениях U_a (В)

U_a	1.0	2.0	3.0	4.0
$E'_1 - iE''_1$	$0.14467 - i3.1 \cdot 10^{-4}$	$0.1445 - i2.9 \cdot 10^{-4}$	$0.1399 - i2.7 \cdot 10^{-4}$	$0.1405 - i2.7 \cdot 10^{-4}$
$E'_2 - iE''_2$	$1.815 - i2.5 \cdot 10^{-3}$	$1.807 - i2.6 \cdot 10^{-3}$	$1.798 - i2.8 \cdot 10^{-3}$	$1.789 - i2.9 \cdot 10^{-3}$
$E'_3 - iE''_3$	$4.4938 - i8.9 \cdot 10^{-3}$	$4.369 - i9.5 \cdot 10^{-3}$	$4.328 - i9.9 \cdot 10^{-3}$	$4.279 - i1.2 \cdot 10^{-2}$
$E'_4 - iE''_4$		$6.872 - i7.2 \cdot 10^{-2}$	$6.982 - i8.3 \cdot 10^{-2}$	

уровней прозрачность одиночного барьера экспоненциально мала по сравнению с $D = 1$ при РТ. Для глубоких уровней формула работает достаточно хорошо, однако при $E = V$ видна ее ограниченность: $D = 1$ при $W = 0$, тогда как решение УШ дает $D < 1$. Этим, в частности, ограничено применение формулы Фаулера – Нордгейма к одиночному барьеру. Тем не менее, результат можно использовать для оценки времен жизни глубоких уровней, вычисляя $D_{(c,a)}$ при $W = V_{c,a} - E_n$ и определяя $\delta_c = D_c$ и $\delta_a = D_a$.

3. ВРЕМЯ ЖИЗНИ УРОВНЯ ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ ПОДХОДЕ

Нестационарное УШ, записываемое как

$$\hat{S}(t, x) \psi(t, x) = V(t, x) \psi(t, x),$$

является релятивистски нековариантным. Здесь мы обозначили оператор Шредингера свободной частицы

$$\hat{S}(t, x) = i\hbar\partial_t + \frac{(\hbar\partial_x)^2}{2m_e}.$$

Это означает, что пропагаторная функция Грина (ПФГ), описывающая распространение частицы из точки x' в момент t' в точку x в момент t и имеющая вид [22, 23]

$$K_0(t - t', x - x') = \text{sgn}(t - t') \sqrt{\frac{m_e}{2\pi i\hbar|t - t'|}} \times \exp\left(\frac{i(x - x')^2 m_e}{2\hbar|t - t'|}\right), \quad (8)$$

дает бесконечно быстрое распространение возмущения. Действительно, ПФГ (8) определяет частицу в

точке x в момент t по ее амплитуде $\psi_0(x', t')$ в точке x' в момент t'

$$\psi_0(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x - x', t - t') \psi_0(t', x') dx'.$$

Если в точке x_0 в момент t_0 возникла плотность вероятности

$$\psi_0(t_0, x) = \delta(x - x_0),$$

т.е. частица локализована в этой точке, то при $t > t_0$ она существует во всех точках бесконечной области:

$$\psi_0(x, t) = K_0(x - x_0, t - t_0),$$

т.е. скорость распространения плотности вероятности бесконечна. Однако плотность вероятности в удаленных точках бесконечно мала. Здесь индекс ноль означает свободную частицу ($V=0$). Такая частица в общем случае описывается как волновой пакет (ВП) с неким спектром волновых чисел k и энергий E . Отметим, что набегающий поток частиц с распределением (2) также есть ВП. ПФГ (8) удовлетворяет начальному условию

$$K_0(t - t', x - x')_{t \rightarrow t'} = \delta(x - x')$$

и уравнению

$$\hat{S}K_0(t - t', x - x') = i\hbar\delta(t - t')\delta(x - x'),$$

см. [22]. Решать нестационарное УШ надо при определенных начальных условиях. Удобно брать в качестве начальных условий при $t = t_0$ стационарный случай, т.е. при $t < t_0$ использовать ВФ $\psi_0(x)$ и потенциал $V_0(x)$. В момент $t \geq t_0$ потенциал $V(x, t)$ начинает изменяться, а ВФ удовлетворяет нестационарному УШ. Она при $t_0 > 0$

определяется интегральным уравнением (ИУ) типа Липпмана – Швингера:

$$\psi(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} K_0(t - t', x - x') \times \\ \times [V(t', x') - V_0(x')] \psi(t', x') dx' dt'. \quad (9)$$

Действительно, при $t \leq 0$ имеем $\psi(x, t) = \psi_0(x)$. При $t > 0$, действуя на (9) оператором \hat{S} , получаем

$$\hat{S}\psi(x, t) = V(t, x) \psi(t', x').$$

Если потенциал

$$\Delta V(t, x) = V(t, x) - V_0(x)$$

локализован в некоторой области, уравнение (9) для малых времен решить достаточно просто. Пример решения для двухбарьерного РТД дан в работе [12]. Это уравнение удобно для исследования переходных процессов и времен туннелирования. Возможны случаи $\Delta V(0, x) = 0$ (плавное изменение потенциала) и $\Delta V(0, x) \neq 0$ (резкое изменение потенциала). Рассмотрим второй случай. Пусть при $t < 0$ имеем яму с одним метастабильным уровнем между двумя барьерами. Этот уровень не может быть заселен, поскольку за бесконечное время состояние всегда распадется. Для простоты рассмотрим уровень между двумя одинаковыми барьерами высоты V . Ничто не мешает считать высоты барьеров разными, но это приводит к более громоздким выкладкам. Такой уровень между одинаковыми барьерами V определяется из уравнения

$$\text{th}(\tilde{k}_1 t_b) \text{th}(k t_w) = \\ = \alpha = \frac{\sqrt{\tilde{E}_1(V - \tilde{E}_1)}}{\tilde{E}_1 - V/2},$$

см. [13]. Здесь величина

$$\tilde{k}_1 = \tilde{k}'_1 + i\tilde{k}''_1 = \frac{\sqrt{2m_e(V - \tilde{E}_1)}}{\hbar}$$

комплексная, $t_1 = t_2 = t_b$ — толщина барьеров. Из этого уравнения можно определить время жизни $\tau_1 = 2\hbar/E_1''$. Удобно искать численное решение в виде

$$E_1 = V_0 \arctg^2(\alpha(E_1)) / \text{th}^2(\tilde{k}_1 t_b),$$

$$V_0 = \hbar^2 / 2m_e t_w^2,$$

представив арктангенс через логарифм. Величины

$$\alpha = \alpha' + i\alpha'' = \sqrt{E_1(V - E_1)} / (E_1 - V/2)$$

и

$$\tilde{k}' = \tilde{k}'_1 + i\tilde{k}''_1$$

комплексные. Для широких барьеров имеем

$$\tilde{k}'_1 = \sqrt{2m_e(V - E'_1)} / \hbar,$$

$$\tilde{k}''_1 = E'_1 \sqrt{m_e / (2V - 2E'_1)} / \hbar,$$

$$\text{th}^2(\tilde{k}_1 t_b) \approx 1 - 4 \exp(-2\tilde{k}'_1 t_b) \exp(-2i\tilde{k}''_1 t_b).$$

Для входящих в уравнение величин получаем

$$\alpha' = \sqrt{E'_1(V - E'_1)} / (E'_1 - V/2),$$

$$\alpha'' = E'_1 \alpha'_1 (1 / (2V - 2E'_1) + 2 / (2E'_1 - V) - 1 / (2E'_1)).$$

Проще всего оценить уровень, считая, что он возникает у границы барьера. Тогда величина α' мала, а

$$\alpha'' \approx 3\alpha'_1 E'_1 / 2V$$

еще более малая величина. Обозначая

$$\delta = 4 \exp(-2\tilde{k}'_1 t_b) \exp(-2i\tilde{k}''_1 t_b),$$

получаем энергию в виде

$$E_1 = (V + V_0) / 2 + \sqrt{V_0^2 / 4 + 3V_0 V / 2 + \delta \Delta E_1},$$

где

$$\Delta E_1 = \frac{(V_0^2 / 4 + 3V_0 V / 4)}{\sqrt{V_0^2 / 4 + 3V_0 V / 2}} + \frac{V_0}{2}.$$

Углубим яму на величину ΔV . Тогда на дне ямы энергия отрицательная. Пусть возможен только один стабильный уровень. Пусть также центр ямы находится при $x=0$. Волновая функция в яме либо четная

$$\psi_0(x) = A_c \cos(k_1 x),$$

либо нечетная

$$\psi_0(x) = A_s \sin(k_1 x),$$

при этом

$$\psi_0(t_w/2) \neq 0, \quad \psi'_0(t_w/2) \neq 0,$$

$$k_1 = \sqrt{2m_e E_1} / \hbar.$$

Обозначим

$$\tilde{k}_0 = \sqrt{2m_e(\Delta V - E_1)} / \hbar,$$

$$\tilde{k}_1 = \sqrt{2m_e(V + \Delta V - E_1)/\hbar},$$

$$z_0 = -i/\tilde{k}_0, \quad \tilde{z}_1 = -i/\tilde{k}_1, \quad z_1 = 1/k_1.$$

Тогда в случае нечетной волновой функции имеем характеристическое уравнение

$$\operatorname{tg}(k_1 t_w/2) = iZ_i/\rho_1,$$

а для четной функции

$$\operatorname{tg}(k_1 t_w/2) = -i\rho_1/Z_i.$$

Величина

$$Z_i = \frac{\tilde{\rho}_1 \left(\tilde{\rho}_0 - \tilde{\rho}_1 \operatorname{th}(\tilde{k}_1 t) \right)}{\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_0 \operatorname{th}(\tilde{k}_1 t)}$$

мнимая, поэтому уравнения действительные и определяют действительные энергии. Нормировку ВФ возьмем из условия нахождения частицы в области ямы $|x| \leq t_w/2$. Это приближенное условие, поскольку есть просачивание вероятности через барьеры. Но при достаточно большой ширине барьеров оно мало. Можно выполнить строгую нормировку, но это дает громоздкие значения амплитуд. В нашем случае для амплитуд имеем

$$|A_c|^2 = [t_w (1 + \sin(t_w k_1) / (t_w k_1))]^{-1},$$

$$|A_s|^2 = [t_w (1 - \sin(t_w k_1) / (t_w k_1))]^{-1}.$$

Понятно, что первым должен возникнуть четный уровень, поскольку ее ВФ примерно соответствует полувогне де-Бройля. Итак, при $t < 0$ существует такой заселенный уровень. В момент $t = 0$ резко включается потенциал $\Delta V > 0$, и дно ямы поднимается до нулевой энергии. В такой яме частица бесконечно долго существовать не может, и начинается распад состояния. Он описывается ИУ

$$\psi(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1}\Delta V \times$$

$$\times \int_0^t \int_{-t_w/2}^{t_w/2} K_0(t-t', x-x') \psi(t', x') dx' dt'. \quad (10)$$

Эту задачу можно решать численно или методом возмущений. В последнем случае первое приближение есть

$$\psi_{(1)}(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1}\Delta V \times$$

$$\times \int_0^t \int_{-t_w/2}^{t_w/2} K_0(t-t', x-x') \psi_0(x') dx' dt'.$$

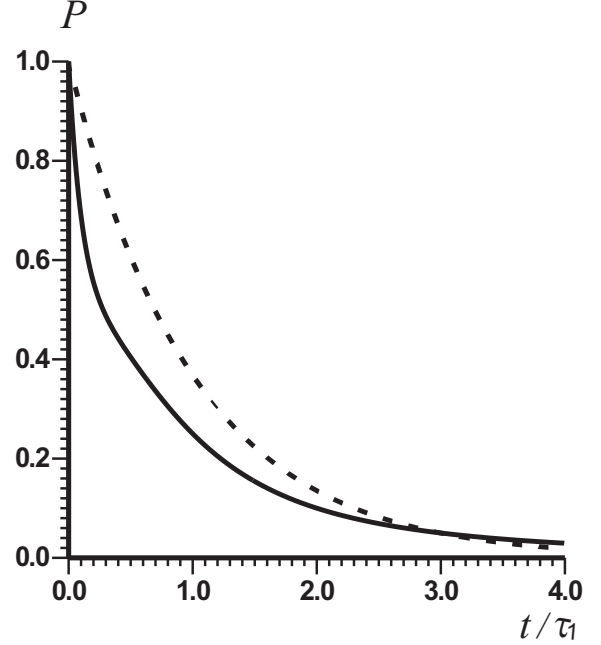


Рис. 4. Вероятность перехода $P(t)$ согласно формуле (12) для распада одиночного уровня. Штриховая кривая обозначает экспоненциальный распад $P_0(t) = \exp(-t/\tau_1)$

Вероятность нахождения частицы в области ямы теперь будет

$$P(t) = \int_{-t_w/2}^{t_w/2} |\psi(t, x)|^2 dx. \quad (11)$$

Она убывает со временем. Решая ИУ (10), вычисляем (8). Очевидно, при взятой нормировке $P(0) = 1$. Аппроксимируя (8) функцией $P_0(t) = \exp(-t/\tau_1)$, определяем время жизни уровня. Соответствующий результат приведен на рис. 4. Он соответствует значению $E_1''/E_1' = 0.021$, $\tau_1 = 59.5$ фс. Следует отметить, что распад такого состояния, вообще говоря, происходит не по экспоненциальному закону [24–35], который выполняется в пределе бесконечно долго живущего уровня [36]. В яме существуют состояния с непрерывным спектром, которые искажают экспоненциальный закон. Непрерывный спектр и интерференция приводят к более быстрому начальному распаду, а затем возникает замедление [17, 24]. Еще более сложный случай соответствует нескольким уровням. Нестационарный подход существенно сложнее, чем определение комплексных корней. Интересно отметить, что для задач туннелирования вычисление плотности вероятности

$$\rho(E) = \int |\psi_0(x, E)|^2 dx$$

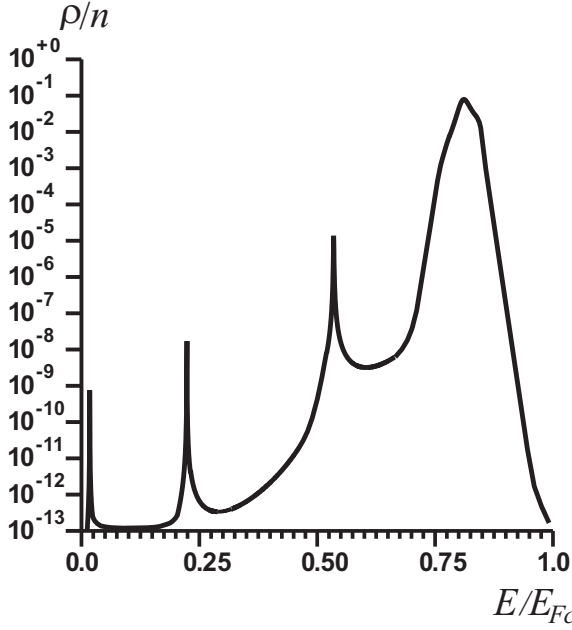


Рис. 5. Нормированная плотность числа частиц ρ в яме в зависимости от энергии E при трех резонансных уровнях (эВ): 0.140552, 1.78936 эВ, 4.27933 (см. таблицу, $U_a = 4$ В)

как по области ямы, так и по области барьеров дает максимумы при энергиях, совпадающих со значениями резонансных уровней E'_n рис. 5. Результат нормирован на плотность числа частиц в обоих потоках

$$n(E) = n^+(E) + n^-(E) = \sqrt{2Em_e^{3/2}}(E_{Fc} - E)/\pi^2\hbar^3.$$

Это связано с тем, что все падающие слева и справа потоки с резонансными энергиями E'_n проходят в яму, а для других энергий они сильно отражаются. Как туннельная плотность тока J , так и плотность потока вероятности j непрерывны вдоль всей структуры, считая и электроды, что есть следствие закона сохранения частиц (вероятности) в нерелятивистской квантовой механике.

4. ПРИМЕНЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО УШ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ

Относительно времени туннелирования с 1930 г. (когда возникло это понятие) по настоящее время нет установившегося понимания в литературе (см. [19] и литературу там). До сих пор рассматриваются парадоксы типа Хартмана, «сверхсветового» туннелирования, отрицательного времени туннелирования и т.п. ИУ (10) вполне удобно для решения

вопроса в таких временах и вообще о переходных процессах [12]. Время жизни (пребывания в структуре) часто связывают со временем туннелирования. Здесь вместо ИУ (9) мы рассмотрим другой подход, основанный на методе рядов для решения нестационарного УШ. Пусть при $t < 0$ в области $0 < x < d$ структуры с тремя электродами $U_a = 0$, а $U_g = -W_c/e$. Пусть также величина d достаточно большая. В этом случае потенциал близок к прямоугольному ширины d и высоты W_c относительно УФ (рис. 1, кривая 0). Относительно нуля его высота $V = W_c + E_{Fc}$. Если бы на сетке было нулевое напряжение, то потенциал (относительно УФ E_{Fc}) имел бы вид двух горбов высоты W_c , разделенных промежутком с нулевой высотой. Кривая 1 на рис. 1 демонстрирует потенциал при отрицательном напряжении на сетке $U_g = -W_c$, когда вся кривая поднята на W_c . Такой потенциал запирает ток. Пусть в момент $t = 0$ потенциалы переключаются так, что $U_a > 0$ и $U_g = E_{Fc}/e$, т.е. задача становится такой, как при РТ. Соответственно надо рассматривать переходные процессы установления туннелирования при $t > 0$ при переключении от кривой 1 к кривым типа 2, 4. Для диодной структуры это переключение от кривой 0 к кривым 3, 5, 7, но без РТ. Макроскопическое изменение тока при таком процессе весьма просто измерить, в отличие от времени туннелирования отдельной частицы. Следует отметить, что при $t < 0$ ток отсутствовал в силу симметрии структуры. Также в эти времена плотность числа частиц в структуре была ничтожно мала, поскольку ничтожно мала вероятность туннелирования через широкий барьер. Вблизи краев плотность экспоненциально спадает. Выбирая d большим, можно считать, что в области барьера частицы отсутствовали. Переключение потенциалов приводит к появлению тока. Он не может появиться мгновенно, поскольку частицам надо пройти область d , что и создает конечное время переходного процесса. Будем решать нестационарное УШ разложением в ряды в области $0 < x < d$:

$$\Psi(t, x) = A \left(\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) \cos(\chi_n x) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(t) \sin(\chi_n x) \right), \quad (12)$$

$$V(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \nu_n(t) \cos(\chi_n x), \quad (13)$$

где $\chi_n = n\pi/d$. Метод пригоден для нескольких электродов, но далее численные результаты пред-

ставлены для диода. Использовать либо косинусы, либо синусы в разложении (12) нельзя, поскольку в этом случае всегда будет нулевая плотность потока вероятности. Для упрощения применим метод к диодной структуре. Амплитуда A введена для нормировки, т. е. при ее задании можно положить $\alpha_0 = 1$. Для вычислений обрежем ряды (12), (13) индексом N . Подставляя (12) и (13) в УШ и используя ортогональность тригонометрических функций, получаем связанные дифференциальные уравнения

$$\begin{aligned} \alpha'_n(t) = & i \sum_{m=0}^N A_{nm}^{cc} \omega_m \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^{cs} \omega_m \beta_m(t) \sin(\chi_m x) - \\ & - \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{m=0}^N V_{nm}^{\alpha cc}(t) \alpha_m(t) + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} V_{nm}^{\beta cs}(t) \beta_m(t) \sin(\chi_m x) \right), \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta'_n(t) = & i \sum_{m=0}^N A_{nm}^{sc} \omega_m \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^{ss} \omega_m \beta_m(t) \sin(\chi_m x) - \\ & - \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{m=0}^N V_{nm}^{\alpha sc}(t) \alpha_m(t) + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} V_{nm}^{\beta ss}(t) \beta_m(t) \sin(\chi_m x) \right). \quad (15) \end{aligned}$$

В них обозначены частоты $\omega_n = \hbar \pi^2 n^2 / (2m_e d^2)$ и матричные элементы, приведенные в Приложении. Это довольно сложные уравнения, если потенциал зависит от времени произвольно. В случае резкого установления потенциала он перестает зависеть от времени, и уравнения упрощаются. Переобозначая матричные элементы, эти уравнения можно записать в более простом виде. Для первого уравнения имеем

$$\begin{aligned} \alpha'_n(t) - i\omega_n \alpha_n(t) = \\ = f_n(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{nn}^{\alpha cc}(t) + i \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{A}_{nm}^{cs}(t) \beta_m(t) + \\ + i \sum_{m=0, m \approx n}^N \tilde{A}_{nm}^{cc}(t) \alpha_m(t). \end{aligned}$$

Решая это уравнение методом Бернулли или методом вариации произвольной постоянной, получим

$$\begin{aligned} \alpha_n(t) = & \alpha_n(0) \exp(i\omega_n t) + \\ & + \exp(i\omega_n t) \int_0^t f_n(t') \exp(-i\omega_n t') dt'. \quad (16) \end{aligned}$$

Аналогично получим

$$\begin{aligned} \beta_n(t) = & \beta_n(0) \exp(i\omega_n t) + \\ & + \exp(i\omega_n t) \int_0^t g_n(t') \exp(-i\omega_n t') dt'. \end{aligned}$$

Здесь обозначены функции

$$\begin{aligned} g_n(t) = & -\frac{i}{\hbar} V_{nn}^{\beta ss}(t) + i \sum_{m=0}^N \tilde{A}_{nm}^{sc}(t) \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1, m \approx n}^{\infty} \tilde{A}_{nm}^{ss}(t) \beta_m(t). \end{aligned}$$

Решение во времени ищем методом дискретизации по времени $t_m = m\Delta t$, $m = 1, 2, \dots$, при этом интегралы вычисляем методом средних. Если известны начальные значения $\alpha_n(0)$, $\beta_n(0)$, то уравнения позволяют найти $\alpha_n(m\Delta t)$, $\beta_n(m\Delta t)$, при этом можно использовать как явные, так и неявные схемы. Входящие сюда модифицированные матричные элементы имеют простой и понятный вид, например,

$$\tilde{A}_{nm}^{\alpha cc}(t) = A_{nm}^{cc} - V_{nm}^{\alpha cc}(t)$$

и т. п. Если такой барьер в момент $t = 0$ мгновенно изменяет форму до $V(x)$, то эти элементы перестают зависеть от времени:

$$\tilde{A}_{nm}^{\alpha cc} = \omega_m A_{nm}^{cc} - V_{nm}^{\alpha cc} / \hbar$$

и т. п. Их можно явно найти, если форма $V(x)$ простая. При большом U_a она близка к треугольнику, поставленному на прямоугольный постамент (рис. 1, кривые 3, 5, 7). При $eU_a = E_F$ высоту постамена можно взять как W , а высоту треугольника как E_F . Реально из-за эффекта Шоттки барьер несколько ниже. Вычисляя интегралы, имеем

$$\begin{aligned} V_{nm}^{\alpha cc} = & (v_{n+m}^c + v_{n-m}^c) / (1 + \delta_{n0}), \\ V_{nm}^{\beta ss} = & (v_{n+m}^s - v_{n-n}^s) / (1 + \delta_{n0}), \\ V_{nm}^{\alpha sc} = & v_{n-m}^s + v_{n+m}^s, \\ V_{nm}^{\beta ss} = & v_{m-n}^c - v_{m+n}^c. \end{aligned}$$

Здесь обозначены значения следующих интегралов

$$\nu_n^c = \frac{1}{d} \int_0^d V(x) \cos(\chi_n x) dx,$$

$$\nu_n^s = \frac{1}{d} \int_0^d V(x) \sin(\chi_n x) dx.$$

Для начального симметричного широкого барьера (кривая 0) высота $V_0 = W + E_F$, а коэффициенты $\alpha_n(t) = 0$ и $\beta_n(t) = 0$ при $t < 0$, поскольку внутри плотность вероятности практически отсутствует. Это приближение тем лучше, чем больше d . Оно означает, что $\alpha_n(t) = 0$, $\beta_n(t) = 0$, т.е. внутри $\Psi(x, t) = 0$, $t < 0$. Берем начальный барьер прямоугольным. Тогда интегралы вычисляются просто, например,

$$\nu_n(0) = V_0 \text{sinc}(n\pi) = V_0 \delta_{n0}.$$

Когда такой барьер при приложении напряжения $U_a = E_F/e$ принимает вид зависимости

$$V(x) \approx W + E_F(1 - x/d)$$

(см. рис. 1, кривая 7), то

$$\nu_n^c = (W + E_F) \delta_{n0} + E_F \text{conc}(n\pi),$$

$$\nu_n^s = W \text{conc}(n\pi) + E_F \text{sinc}(n\pi).$$

В нашем случае

$$\nu_n^s = W \text{conc}(n\pi).$$

Считаем, что в момент включения напряжения некоторые коэффициенты $\alpha_n(0)$ и $\beta_n(0)$ мгновенно изменяются от нуля. Это происходит за счет включения потока плотности вероятности. Найдем их из условия непрерывности плотности этого потока. Слева перед барьером спектральная ВФ имеет вид

$$\psi(x, k) = a^+(k) [\exp(ikx) + R^+(k) \exp(ikx)],$$

а справа соответственно

$$\begin{aligned} \psi(x, \tilde{k}) &= \\ &= a^-(\tilde{k}) [\exp(-i\tilde{k}(x-d)) - \exp(i\tilde{k}(x-d))]. \end{aligned}$$

При этом

$$\psi(d, k) = 0, \quad \psi'(d, \tilde{k}) = -2i\tilde{k}a^-(\tilde{k}),$$

и при большом напряжении

$$|\psi'(d, k)/\psi'(0, \tilde{k})| \ll 1.$$

При включении напряжения электрохимический потенциал на катоде скачком увеличивается, поэтому

$$\begin{aligned} \sqrt{2m_e e U_a}/\hbar < k < \sqrt{2m_e (E_{Fc} + e U_a)}/\hbar, \\ 0 < \tilde{k} < \sqrt{2m_e E_{Fa}}/\hbar. \end{aligned}$$

Теперь коэффициенты α_n , β_n в ВФ (13) при $t > 0$ становятся отличными от нуля. Они безразмерные, поэтому следует определить амплитуду A из нормировки на поток частиц. Поток справа при большом U_a вполне можно взять равным нулю:

$$j(d) = 0.$$

Поток слева для волновой функции

$$\psi(x, k) = a^+(k) [\exp(ikx) + R^+(k) \exp(ikx)]$$

имеет вид

$$j(0, k) = \frac{\hbar k |a^+(k)|^2}{m_e} (1 - |R^+(k)|^2).$$

Полный поток получаем интегрированием:

$$\begin{aligned} j(0) &= \frac{\hbar}{m_e} \int_0^{k_F} |a^+(k)|^2 (1 - |R^+(k)|^2) k dk = \\ &= \frac{m_e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} (1 - |R^+(E)|^2) (E_F - E) dE. \end{aligned}$$

Вычисляя поток внутрь барьера слева при $x = 0$, найдем условие

$$\begin{aligned} j(0) &= -i \frac{\hbar}{m_e} \text{Re} \Psi'(0, 0) \Psi^*(0, 0) = \\ &= -\frac{\hbar |A|^2}{m_e} \text{Re} \left(i \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n \beta_n(0) \right) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m^*(0) \right). \end{aligned}$$

Для потока справа (с анода) найдем

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar |A|^2}{m_e} \text{Re} \left(i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \chi_n \beta_n(0) \right) \times \\ &\times \left(\sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \alpha_m^*(0) \right) = 0. \end{aligned}$$

Необходимо также приравнять ВФ и их производные на границах области:

$$\Psi(0, 0) = A \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(0),$$

$$\begin{aligned}\Psi'(0,0) &= A \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n \beta_n(0), \\ \Psi(0,d) &= A \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \alpha_n(0) = 0, \\ \Psi'(0,d) &= A \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \chi_n \beta_n(0) = 0.\end{aligned}$$

Последнее равенство мы приравняли нулю, поскольку считаем напряжение большим, а энергию отсчитываем от нуля зоны проводимости катода. Имеем шесть дополнительных уравнений для определения бесконечного числа начальных условий $\alpha_n(0)$, $\beta_n(0)$. Однако использование полного набора синусов в (12) избыточно, поскольку система косинусов полна для аппроксимации ВФ. Мы ввели синусы для получения ненулевых потоков и ненулевых производных ВФ на границах. Вполне можно положить $\alpha_n(0) = 0$, $n > 2$, $\beta_n(0) = 0$, $n > 3$. Тогда неизвестных шесть, как и условий. Однако ненулевыми достаточно взять коэффициенты $\alpha_0(0)$, $\alpha_1(0)$, $\beta_1(0)$, $\beta_2(0)$. Тогда

$$\alpha_1(0) = \alpha_0(0), \quad \beta_2(0) = \beta_1(0)/2,$$

и все шесть уравнений удовлетворяются, при этом

$$j(0) = -\frac{4\pi\hbar|A|^2}{m_e d} \operatorname{Re}(i\beta_1(0)\alpha_0^*(0)).$$

Удобно взять

$$\beta_1(0) = i\alpha_0(0), \quad \alpha_0(0) = 1.$$

Тогда

$$j(0) = \frac{4\pi\hbar|A|^2}{m_e d},$$

и ВФ примет вид

$$\begin{aligned}\Psi(t,x) &= \sqrt{\frac{j(0)m_e d}{4\pi\hbar}} \times \\ &\times \left(\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) \cos(\chi_n x) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(t) \sin(\chi_n x) \right). \quad (17)\end{aligned}$$

Из него находим $\Psi(t,d)$ и $\Psi'(t,d)$. Другой способ получения решений уравнений (14), (15) — использование преобразований Фурье

$$\begin{pmatrix} \alpha_n(t) \\ \beta_n(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} \alpha_n(\omega) \\ \beta_n(\omega) \end{pmatrix} \exp(i\omega t) d\omega,$$

что связано с необходимостью вычисления интегралов. Это можно сделать методом вычетов, но это вопрос, требующий отдельного рассмотрения.

Для решения задачи надо определить начальную ВФ $\Psi(0,x)$ и ее производную, что будет сделано далее. Удобно ввести частоту $\omega = E/\hbar$. Тогда падающий слева ВП можно записать так:

$$\Psi(t,0) = \int_0^{E/\hbar} \psi^+(0,\omega) \exp(-i\omega t) d\omega,$$

$$\psi^+(0,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(0,\omega) \exp(i\omega t) d\omega.$$

Здесь

$$\omega = k^2 \hbar / 2m_e, \quad k = \sqrt{2m_e \omega / \hbar}.$$

Пренебрегая обратным туннелированием, имеем слева

$$\Psi(t,0) = \int_0^{E/\hbar} a^+(\omega) (1 + R^+(\omega)) \exp(-i\omega t) d\omega,$$

а справа получаем

$$\Psi(t,d) = \int_0^{E_F/\hbar} a^+(\omega) T^+(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Падающий слева ВП обозначим

$$\Psi^+(t) = \int_0^{E/\hbar} a^+(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Здесь

$$\psi^+(0,\omega) = a^+(\omega), \quad \psi^+(d,\omega) = a^+(\omega) T^+(\omega).$$

Определяя $\Psi(x,t)$ как решение нестационарного УШ в момент t , построим функцию

$$\tilde{\Psi}(x,t) = \Psi(x,t) - \Psi(x,0).$$

Она равна нулю вне интервала $(0,t)$, т. е. имеет ограниченный носитель, и

$$\tilde{\Psi}(x,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^t \tilde{\Psi}(x,t') \exp(i\omega t') dt',$$

$$\Psi(x,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^t \Psi(x,t') \exp(i\omega t') dt'.$$

Можно построить зависящие от времени коэффициенты отражения и прохождения $R^+(t)$, $T^+(t)$. Именно, следует взять

$$R^+(t) = \Psi(0,t) / \Psi^+(t) - 1,$$

$$T^+(t) = \Psi(d, t) / \Psi^+(t).$$

При учете обратного туннелирования определим падающий справа ВП

$$\Psi^-(t) = \int_0^{E/\hbar} a^-(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Тогда имеем

$$\Psi(t, 0) = \Psi^+(t) (1 + R^+(t)) + T^-(t) \Psi^-(t),$$

$$\Psi(t, d) = \Psi^+(t) T^+(t) + \Psi^-(t) (1 + R^-(t)).$$

Чтобы найти все коэффициенты, надо еще определить $\Psi'(t, x)$, Ψ'^+ и Ψ'^- . Находить производные можно, дифференцируя ряды.

Плотность тока на аноде определяем через плотность потока вероятности

$$J(t_m) = -ej(t_m, d).$$

Для нее при нормировке ВФ на плотность вероятности надо взять [20]

$$\begin{aligned} j(t_m, x) &= \\ &= -\frac{i\hbar}{2m_e} \left[\Psi^*(t_m, x) \partial_x \Psi(t_m, x) - \right. \\ &\quad \left. - \Psi(t_m, x) \partial_x \Psi^*(t_m, x) \right]. \end{aligned}$$

Для произвольного момента времени получим

$$\begin{aligned} j(t, x) &= \frac{j(0)}{4} \times \\ &\times \operatorname{Re} \left(-i \sum_{m=0}^{\infty} [\alpha_m^*(t) \cos(\chi_m x) + \beta_n^*(t) \sin(\chi_m x)] \times \right. \\ &\quad \left. \times \sum_{n=1}^{\infty} n [-\alpha_n(t) \sin(\chi_n x) + \beta_n(t) \cos(\chi_n x)] \right), \\ j(t, d) &= \frac{j(0)}{4} \times \\ &\times \operatorname{Re} \left(-i \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \alpha_m^*(t) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \beta_n(t) \right). \end{aligned}$$

Из этого уравнения следует

$$j(0, d) = 0, \quad j(\Delta t, d) \sim \Delta t,$$

т.е. не может быть мгновенного туннелирования и отрицательного времени туннелирования. Через

спектры $\Psi(d, \omega)$ и $\Psi'(d, \omega)$ результат можно представить в виде

$$\begin{aligned} j(t, d) &= \frac{\hbar}{(2\pi)^2 m_e} \times \\ &\times \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} (-i) \Psi^*(d, \omega) \Psi'(d, \omega') \exp(i(\omega' - \omega)t) d\omega' d\omega. \end{aligned}$$

Для установившегося процесса спектральная ФВ на аноде

$$\psi(x, k) = a^+(k) T^+(k) \exp(ik_a(x - d))$$

легко определяется. Плотность потока вероятности для нее

$$dj(d, k) = v_a(k) |a^+(k) T^+(k)|^2 dk,$$

где скорость на аноде

$$v_a(k) = \sqrt{v^2(k) + 2eU_a/m_e}.$$

Следует отметить, что эта скорость больше $v(k)$ из-за ускорения анодом прошедших сквозь барьер электронов. На длине свободного пробега они рассеиваются и переходят на УФ анода, при этом $v_a(k)$ падает до $v(k)$, а анод нагревается. Рассмотренный метод рядов удобен и для совместного решения УШ и УП.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 6 и 7 приведены результаты вычисления переходного процесса в виде установления анодного тока в диоде с ЭФ 7 эВ и распределения плотности вероятности $|\Psi(x, t)|^2$, когда на аноде скачком возникают напряжения 3, 5 и 7 В. На рис. 7 представлено распределение плотности вероятности для кривой 1 рис. 6 в разные моменты времени. Колебания плотности вероятности есть следствие конечности сумм. С увеличением членов в суммах размах колебаний и период уменьшаются. Использовано интегрирование УШ методом рядов с учетом 40 членов в рядах с явным методом вычисления коэффициентов в (12). Разложение по другим базисам в (12) позволяет исключить колебания. Например, можно использовать конечные элементы. Однако предложенный метод рядов удобен при одновременном решении УШ и УП. Для УП он использован в [2].

При расчетах использовано 200 временных точек. Кривые 2, 3 на рис. 5 построены для 50 временных точек. Для меди (ЭФ 7 эВ) имеем концентрацию электронов $8.5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ и скорость Ферми $v_F = 1.57 \cdot 10^6 \text{ м/с}$, т.е. частица с такой скоростью проходит дистанцию $d = 10 \text{ нм}$ за время

$\tau = 6.37$ фс. Мы считали, что в момент включения напряжения плотность вероятности внутри барьера была нулевая. Более точно она распределена симметрично относительно центра примерно по гиперболическому косинусу, т.е. возрастает к краям, но на этих краях она экстремально мала, поскольку коэффициенты отражения широкого почти прямоугольного барьера близки к минус единице. При этом нет потока плотности вероятности внутрь барьера. Результаты рис. 6 говорят о том, что средняя скорость переноса плотности вероятности несколько больше v_F , что позволяет сделать вывод: движение плотности вероятности есть коллективный эффект, обусловленный интерференцией парциальных волн ВП. Электрон внутри барьера или вообще в некотором потенциальном поле есть квазичастица, определяемая взаимодействием с множеством других частиц. Это усредненное взаимодействие и определяет потенциал. Наглядный пример — потенциал метода изображений. Такая квазичастица не обязана вести себя подобно свободному электрону. Кроме того, пройдя точку поворота для одиночного барьера, электрон движется квазиклассически и ускоряется анодом. Дополнительно приобретаемая скорость при $U_a = 5$ В равна $1.33 \cdot 10^6$ м/с, т.е. примерно такая, как v_F . Соответственно время пролета сокращается в два раза. Аналогичная задача для РТ приводит к существенно большему времени переходного процесса. Это можно объяснить тем, что для РТ необходимо сформировать отражения от барьеров. Формально можно рассматривать времена жизни уровней как дополнительный вклад во время переходного процесса. На рис. 6 видно, что при малых временах плотность вероятности весьма мала. Эта функция несимметричная и в среднем у начала барьера больше, а при больших временах уравнивается. Аналогичные вычисления переходных процессов для переключения от широкого барьера к структуре с узкими неравными барьерами и ямой дает более медленное нарастание тока. Это объясняется отражениями от барьеров для получения резонансных уровней в яме. Для достижения полного РТ высоты барьеров должны быть достаточно близкими. Численное вычисление прозрачностей кроме полных резонансов демонстрирует и пики с неполным РТ, когда максимумы $D < 1$. Что касается времен жизни $\tau_n = 2\hbar/E_n''$, то они существенно меньше аналогичных времен, определяемых на малых временах из нестационарных процессов как результат эволюции ВП. Это связано с тем, что ВП содержит широкий спектр энергий. На больших временах проявляется неэкспоненциальный характер за-

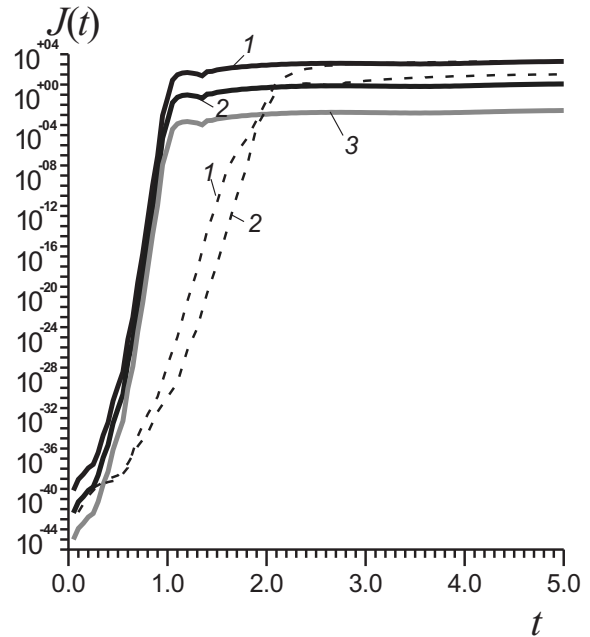


Рис. 6. Переходные процессы ($-J$ в А/см², время в фс) при переключении от почти прямоугольного барьера 1 к барьерам 2, 3, 4, рис. 1 (соответственно, кривые 1, 2, 3)

тухания уровня (см., например, [30–34]) и вклад в него алгебраических членов. Определять таким способом времена жизни уровней можно для весьма узких ВП, что экспериментально весьма сложно реализовать для нерелятивистских квантовых частиц, а тем более сложно обнаружить их прохождение через барьер. Здесь возникают проблемы с отражением спектрально узкого (т.е. весьма пространственно широкого) ВП от барьера [18], особенно когда он изменяется во времени. Макроскопическую же плотность тока можно весьма точно измерить.

Имеющую размерность скорости величину

$$v(x, t) = j(x, t) / |\Psi(x, t)|^2$$

можно трактовать как скорость движения плотности вероятности в точке x в момент t . Она соответствует концепции Н. А. Умова, однако не может трактоваться как скорость отдельной частицы. Для односкоростного потока частиц она совпадает со скоростью частиц в потоке. Возрастание тока сопровождается возрастанием плотности вероятности нахождения частиц внутри барьера. Среднюю мгновенную скорость движения ВП через точку x за время τ можно определить как

$$\bar{v}(x, t, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \frac{j(x, t')}{|\Psi(x, t')|^2} dt'. \quad (18)$$

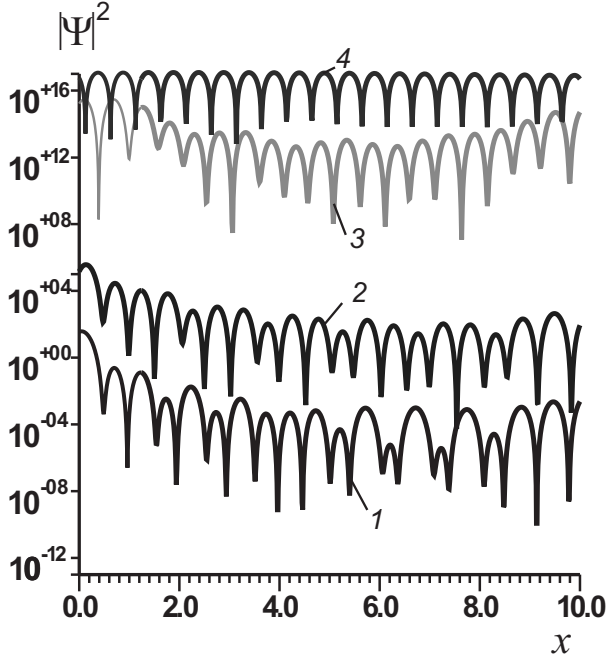


Рис. 7. Плотность числа частиц (м^3) в зависимости от координаты x (нм) в вакуумной диодной структуре для разных моментов времени (фс): 0.1 (1), 0.3 (2), 0.5 (3), 1.0 (4)

Если ВП конечный во времени, можно определить и его среднюю скорость.

Малые времена жизни квазистационарных уровней необходимы для получения больших плотностей тока полевой эмиссии. Желательно иметь как можно больше таких уровней, причем достаточно глубоких. Увеличение числа уровней достигается увеличением ширины квантовой ямы, а уменьшение времен жизни — использованием барьеров малой ширины. Также увеличению тока способствует выравнивание высот барьеров, что можно регулировать сеточным напряжением и изменением РВ сетки.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания №FSRR-2023-0008 и при поддержке Программы стратегического академического лидерства РУДН, проект № 021934-0-000.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для ямы из условий у катодного барьера имеем

$$A_w^+ = \frac{A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c) + A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c)}{2} +$$

$$+ \frac{\tilde{k}_c A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) - \tilde{k}_c A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c)}{2ik},$$

$$A_w^- = \frac{A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c) + A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c)}{2} - \frac{\tilde{k}_c A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) - \tilde{k}_c A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c)}{2ik}.$$

В случае широких барьеров, пренебрегая экспоненциально малыми членами (отражениями от левой границы барьера с амплитудой A_c^+), найдем из условий согласования на барьере около катода

$$A_w^+ \approx \frac{A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - i\tilde{k}_a/k_0)}{2},$$

$$A_w^- \approx \frac{A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 + i\tilde{k}_a/k_0)}{2}.$$

С другой стороны, согласование у анодного барьера дает

$$A_w^+ = \frac{\exp(-ik_0 t_w) [A_a^+ + A_a^- + i(A_a^+ - A_a^-) \tilde{k}_a/k_0]}{2},$$

$$A_w^- = \frac{\exp(ik_0 t_w) [A_a^+ + A_a^- - i(A_a^+ - A_a^-) \tilde{k}_a/k_0]}{2}.$$

На границе катода имеем соотношения

$$A_c^+ = \frac{A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c)}{2},$$

$$A_c^- = \frac{A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c)}{2}.$$

На границе анода имеем соответственно

$$A_a^+ = \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_a/\tilde{k}_a)}{2},$$

$$A_a^- = \frac{A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_a/\tilde{k}_a)}{2}.$$

Для широких барьеров амплитуды A_a^- и A_a^+ малы. Полагая их равными нулю, получаем

$$A_w^+ \approx \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 + i\tilde{k}_a/k_0) \exp(-ik_0 t_w)}{4},$$

$$A_w^+ \approx \frac{A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 - i\tilde{k}_c/k_0)}{4},$$

$$A_w^- = \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 - i\tilde{k}_a/k_0) \exp(ik_0 t_w)}{4},$$

$$A_w^- \approx \frac{A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 + i\tilde{k}_c/k_0)}{4}.$$

Приравнявая коэффициенты A_w^\pm , имеем два уравнения

$$A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 + i\tilde{k}_a/k_0) \exp(-ik_0 t_w) =$$

$$= A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 - i\tilde{k}_c/k_0),$$

$$A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 - i\tilde{k}_a/k_0) \exp(ik_0 t_w) =$$

$$= A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 + i\tilde{k}_c/k_0).$$

Разделив первое на второе, получаем приближенное характеристическое уравнение

$$\frac{(1 - i\tilde{k}_A/k_0) (1 - i\tilde{k}_a/k_0)}{(1 + i\tilde{k}_A/k_0) (1 + i\tilde{k}_a/k_0)} = \exp(-2ik_0 t_w). \quad (\text{П } 1)$$

Для получения точного уравнения следует оставить все амплитуды. В этом случае, приравнявая коэффициенты, получаем

$$\begin{pmatrix} A_A^+ \\ A_A^- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_a^+ \\ A_a^- \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A_a^+ \\ A_a^- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^{-1} & M_{12}^{-1} \\ M_{21}^{-1} & M_{22}^{-1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_c^+ \\ A_c^- \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы \hat{M} имеют вид

$$M_{11} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{11} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c) + (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_A) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{12} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{12} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_A) - (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_A) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{21} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{21} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) [1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_A] + (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_c) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{22} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{22} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c) - (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_c) \sin(k_0 t_w)}{2}.$$

Теперь

$$A_c^+ = A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c) =$$

$$= 2 (M_{11} A_a^+ + M_{12} A_a^-),$$

$$A_c^- = A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) =$$

$$= 2 (M_{21} A_a^+ + M_{22} A_a^-).$$

Подставляя в эти уравнения A_a^\pm , получаем

$$A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c) = M_{11} A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) +$$

$$+ M_{12} A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a),$$

$$A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) = M_{21} A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) +$$

$$+ M_{22} A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a).$$

Разделив первое уравнение на второе, имеем характеристическое уравнение

$$\frac{1 + ik_0/\tilde{k}_c}{1 - ik_0/\tilde{k}_c} = f(E) = \quad (\text{П } 2)$$

$$= \frac{\tilde{M}_{11} \exp(\tilde{k}_c t_c + \tilde{k}_a t_a) + \tilde{M}_{12} \exp(\tilde{k}_c t_c - \tilde{k}_a t_a)}{\tilde{M}_{21} \exp(\tilde{k}_a t_a - \tilde{k}_c t_c) + \tilde{M}_{22} \exp(-\tilde{k}_a t_a - \tilde{k}_c t_c)}.$$

Для широких барьеров в нем можно опустить малые члены, и тогда

$$f(E) \approx \exp(2\tilde{k}_c t_c) \times$$

$$\times \frac{1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c + (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_c) \operatorname{tg}(k_0 t_w)}{1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_c + (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_c) \operatorname{tg}(k_0 t_w)}.$$

Входящие в уравнения (14), (15) матричные элементы имеют вид

$$A_{nm}^{cc} = \frac{\operatorname{sinc}((\chi_n - \chi_m)d) + \operatorname{sinc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \operatorname{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{\delta_{nm}}{1 + \delta_{n0}},$$

$$A_{nm}^{cs} = \frac{\text{conc}((\chi_n - \chi_m)d) - \text{conc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \text{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{(-1)^{n+m} - (-1)^{n-m}}{1 + \delta_{n0}}, \quad (\text{П3})$$

$$A_{nm}^{sc} = \frac{\text{conc}((\chi_n - \chi_m)d) + \text{conc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \text{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{2 - (-1)^{n-m} - (-1)^{n+m}}{1 + \delta_{n0}},$$

$$A_{nm}^{ss} = \frac{\text{sinc}((\chi_n - \chi_m)d) - \text{sinc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 - \text{sinc}(2\chi_n d)} = \delta_{nm}.$$

В них обозначены интегралы

$$V_{nm}^{\alpha cc}(t) = \frac{2}{(1 + \delta_{n0})d} \int_0^d V(t, x) \cos(\chi_n x) \cos(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\beta ss}(t) = \frac{2}{(1 + \delta_{n0})d} \int_0^d V(t, x) \cos(\chi_n x) \sin(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\beta ss}(t) = 2 \int_0^d V(t, x) \sin(\chi_n x) \sin(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\alpha sc}(t) = 2 \int_0^d V(t, x) \sin(\chi_n x) \cos(\chi_m x) dx.$$

В (П3) входят функции $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$ и $\text{conc}(x) = (1 - \cos(x))/x$. Эти функции в нуле следует определить как $\text{sinc}(0) = 1$, $\text{conc}(0) = 0$. При этом $\text{sinc}(2n\pi) = \delta_{n0}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. V. Davidovich, I. S. Nefedov, O. E. Glukhova, and M. M. Slepchenkov, *Toward the Theory of Resonant-Tunneling Triode and Tetrode with CNT-Graphene Grids*, J. Appl. Phys. **130**(20), 204301 (2021), DOI: 10.1063/5.0067763.
2. М. В. Давидович, *Особенности вакуумного резонансного туннелирования на одноямном и двухъямном барьерных потенциалах*, ЖЭТФ **92**(9), 1387 (2022) [M. V. Davidovich, *Peculiarities of Vacuum Resonant Tunneling at One- and Two-Well Barrier Potentials*, Technical Physics **67**(9), 1196 (2022), DOI: 10.21883/TP.2022.09.54684.257-21].
3. M. V. Davidovich, I. S. Nefedov, O. E. Glukhova, M. M. Slepchenkov, and J. M. Rubi, *Field Emission in Vacuum Resonant Tunneling Heterostructures with High Current Densities*, Scientific Reports **13**, 19365 (2023), DOI: 10.1038/s41598-023-44900-2.
4. R. Tsu and L. Esaki, *Tunneling in a Finite Superlattice*, Appl. Phys. Lett. **22**(11) 562 (1973), DOI: 10.1063/1.1654509 (1973).
5. L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, *Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barriers*, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974), DOI: 10.1063/1.1655067.
6. E. X. Ping and H. X. Jiang, *Resonant Tunneling of Double-Barrier Quantum Wells Affected by Interface Roughness*, Phys. Rev. B **40**(17), 11792 (1989).
7. O. Pinaud, *Transient Simulations of a Resonant Tunneling Diode*, J. Appl. Phys. **92**(4), 1987 (2002), DOI: 10.1063/1.1494127.
8. В. Ф. Елесин, *Перестраиваемый терагерцовый генератор на двухъямной наноструктуре с когерентной электронной подсистемой*, ЖЭТФ **128**(5), 922 (2005) [V. F. Elesin, *A Tunable Terahertz-Band Oscillator Based on a Two-Well Nanostructure with a Coherent Electron Subsystem*, JETP **101**(5), 795 (2005), DOI: 10.1134/1.2149060].
9. В. Ф. Елесин, *Переходные процессы в двухбарьерных наноструктурах*, ЖЭТФ **145**(6), 1078 (2014) [V. F. Elesin, *Transient Processes in Two-Barrier Nanostructures*, JETP **118**(6), 951 (2014), DOI: 10.1134/S1063776114060041].
10. В. Ф. Елесин, Ю. В. Копаев, *Лазер на «штарковской лестнице» с когерентной электронной подсистемой*, ЖЭТФ **123**(6), 1308 (2003) [V. F. Elesin and Yu. V. Kopayev, *Stark Ladder Laser with a Coherent Electron Subsystem*, JETP **96**(6), 1149 (2003), DOI: 10.1134/1.1591227].
11. К. С. Гришаков, В. Ф. Елесин, *Времена перехода резонансно-туннельного диода между экстремальными точками гистерезисной вольт-амперной характеристики*, ФТП **50**(8), 1113 (2016) [K. S. Grishakov

- and V. F. Elesin, *Transition Times Between the Extremum Points of the Current-Voltage Characteristics of a Resonant Tunneling Diode with Hysteresis*, *Semiconductors* **50**(8), 1092 (2016), DOI: 10.1134/S1063782616080121].
12. М. В. Давидович, *Нестационарное резонансное туннелирование в диодной двухбарьерной структуре*, Письма в ЖЭТФ **110**(7), 465 (2019) [M. V. Davidovich, *Time-Dependent Resonant Tunneling in a Double-Barrier Diode Structure*, *JETP Letters* **110**(7), 472 (2019), DOI: 10.1134/S0370274X19190068].
 13. Е. А. Нелин, *Импедансная модель для «барьерных задач» квантовой механики*, УФН **177**(3) (2007), 307 [E. A. Nelin, *Impedance Model for Quantum Mechanical Barrier Problems*, *Phys. Usp.* **50**, 293 (2007), DOI: 10.3367/UFNr.0177.200703d.0307].
 14. J. G. Simmons, *Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film*, *J. Appl. Phys.* **34**, 1793 (1963), DOI: 10.1063/1.1702682.
 15. J. Robertson, *Diamond-Like Amorphous Carbon*, *Materials Science and Engineering R*, 129 (2002), DOI:10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
 16. Е. Р. Лубенец, *К вопросу о распаде квазистационарных состояний нерелятивистской квантовой механике*, ТМФ **32** (1977), 279 [E. R. Lubenets, *On the decay of quasistationary states in nonrelativistic quantum mechanics*, *Theor. Math. Phys.* **32**, 741 (1977), DOI: 10.1007/BF01036339].
 17. Г. Ф. Друкарев, *К теории прохождения частицы через потенциальный барьер*, ЖЭТФ **51**(1), 59 (1951).
 18. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
 19. М. В. Давидович, *О временах и скоростях нестационарного квантового и электромагнитного туннелирования*, ЖЭТФ **157**(1), 44 (2020) [M. V. Davidovich, *On Times and Speeds of Time-Dependent Quantum and Electromagnetic Tunneling*, *JETP* **130**(1), 35 (2020), DOI: 10.1134/S1063776119120161].
 20. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1972) [A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon (1965)].
 21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, ГИФФМЛ, Москва (1962) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory*, Pergamon (1965)].
 22. В. Н. Грибов, *Квантовая электродинамика*, НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, Ижевск (2001).
 23. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва (1977).
 24. L. Fonda, G. C. Ghirardi, and A. Rimini, *Decay Theory of Unstable Quantum Systems*, *Rep. Prog. Phys.* **41**(4), 587 (1978), DOI: 10.1088/0034-4885/41/4/003.
 25. E. C. G. Sudarshan, C. B. Chiu, and G. Bhamathi, *Unstable Systems in Generalized Quantum Theory*, *Adv. Chem. Phys.* **99**(3), 121 (1997), DOI: 10.1002/9780470141588.ch2.
 26. L. M. Krauss and J. Dent, *Late Time Behavior of False Vacuum Decay: Possible Implications for Cosmology and Metastable Inflating States*, *Phys. Rev. Lett.* **100**(17), 171301 (2008), DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.171301.
 27. Л. А. Халфин, *Вклад в теорию распада квазистационарного состояния*, ЖЭТФ **33**(6), 1371 (1958).
 28. C. B. Chiu, E. C. G. Sudarshan, and B. Misra, *Time Evolution of Unstable Quantum States and a Resolution of Zeno's Paradox*, *Phys. Rev. D* **16**(2), 520 (1977), DOI: 10.1103/PhysRevD.16.520.
 29. G. Garcia-Calderon and R. Romo, *Interference in the Time Domain of a Decaying Particle with Itself as the Physical Mechanism for the Exponential-Nonexponential Transition in Quantum Decay*, *Phys. Rev. A* **100**(3), 032121 (2019), DOI: 10.1103/PhysRevA.100.032121.
 30. P. Facchi and S. Pascazio, *Quantum Zeno Dynamics: Mathematical and Physical Aspects*, *J. Phys. A* **41**(49), 493001 (2008), DOI:10.1016/S0375-9601(00)00566-1.

31. C. Rothe, S. I. Hintschich, and A. P. Monkman, *Violation of the Exponential-Decay Law at Long Times*, Phys. Rev. Lett. **96**(16), 163601 (2006).
32. C. Anastopoulos, *Decays of Unstable Quantum Systems*, Int. J. Theor. Phys. **58**(3), 890 (2019), DOI: 10.1007/s10773-018-3984-z.
33. S. D. Druger and M. A. Samuel, *Nonexponential Decay in Autoionization Near Threshold*, Phys. Rev. A **30**(1), 640 (1984), DOI: 10.1103/PhysRevA.30.640.
34. C. A. Nicolaides, *Physical Constraints on Nonstationary States and Nonexponential Decay*, Phys. Rev. A **66**(2), 022118 (2002), DOI: 10.1103/PhysRevA.66.022118.
35. N. G. Kelkar, M. Nowakowski, and K. P. Khemchandani, *Hidden Evidence of Nonexponential Nuclear Decay*, Phys. Rev. C **70**(2), 024601, (2004), DOI: 10.1103/PhysRevC.70.02460.
36. R. G. Newton, *The Exponential Decay Law of Unstable Systems*, Ann. Phys. **14**(1), 333 (1961), DOI: 10.1016/0003-4916(61)90060-4.

ИНДУЦИРОВАННЫЕ ВУФ-ИМПУЛЬСОМ КАНАЛЫ ГЕНЕРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМОМ В ИНТЕНСИВНОМ ЛАЗЕРНОМ ИК-ПОЛЕ

Я. В. Бреев ^{a,b}, А. А. Минина ^{a,b}, А. В. Флегель ^{a,b*}, М. В. Фролов ^{a,b**}

^a Воронежский государственный университет
394018, Воронеж, Россия

^b Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 13 сентября 2024 г.,
после переработки 13 сентября 2024 г.
Принята к публикации 26 сентября 2024 г.

Развита теория возмущений по взаимодействию с изолированным высокочастотным аттосекундным импульсом в области вакуумного ультрафиолета (ВУФ) с атомной системой, модифицированной интенсивным инфракрасным (ИК) полем. Получены аналитические выражения для ВУФ-индуцированных поправок к волновой функции атомного электрона в ИК-поле и для амплитуды генерации излучения в произвольном порядке теории возмущений. Проанализирован вклад парциальных амплитуд генерации излучения для различных каналов с поглощением ВУФ-фотонов как на этапе ионизации, так и на этапе рекомбинации электрона с атомным остовом в соответствии с трехшаговым механизмом перерассеяния. Выявлены области параметров ИК- и ВУФ-импульсов, при которых возможна интерференция различных ВУФ-индуцированных каналов вплоть до третьего порядка теории возмущений по взаимодействию с ВУФ-импульсом.

DOI: 10.31857/S004445102501002X

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени достигнут существенный прогресс в теоретическом описании нелинейных эффектов, возникающих при взаимодействии интенсивного лазерного поля в инфракрасном (ИК) диапазоне с атомными системами. Квантовомеханическое описание индуцированных интенсивным ИК-полем процессов предполагает два подхода: численные методы, например, основанные на решении нестационарного уравнения Шредингера (НУШ) и его различных упрощенных вариаций для случая многоэлектронных систем (метод функционала плотности, нестационарный метод Хартри–Фока) [1–9], и аналитические подходы. Численные расчеты как правило служат «эталоном» для проверки точности аналитических подходов и демонстрируют свою эффективность при нахождении нели-

нейного отклика атомной системы на внешнее интенсивное переменное электрическое поле. Однако, результаты численного интегрирования могут быть получены лишь при фиксированных параметрах лазерного излучения и не обладают существенной предсказательной силой, а именно, в большинстве случаев необходимо проводить многочисленные затратные по времени вычисления для достижения необходимой физической интерпретации наблюдаемого эффекта. Напротив, аналитические теории в большей степени направлены на выявление общих фундаментальных закономерностей в нелинейном взаимодействии атомной системы с интенсивным лазерным полем.

Аналитические подходы к описанию нелинейных эффектов при взаимодействии ИК-поля с атомами или молекулярными системами, как правило, основываются на одноэлектронном приближении, в рамках которого (с учетом очевидных ограничений) удается получить выражения для амплитуд и сечений фундаментальных лазерно-индуцированных и лазерно-модифицированных атомных процессов с

* E-mail: flegel@cs.vsu.ru

** E-mail: frolov@phys.vsu.ru

точностью, не уступающей результатам численного решения НУШ [10–16]. Принципиальным преимуществом аналитических подходов по сравнению с численными является возможность установить общую параметризацию вероятностей фотопроцессов в поле интенсивного лазерного импульса от фундаментальных характеристик мишени (потенциала $U(r)$ взаимодействия электрона с атомным остовом) и параметров импульса (см., например, [17]). Полученные параметризации допускают дальнейшее обобщение на многоэлектронные системы с возможностью исследования влияния эффектов внутренней электронной динамики в лазерно-индуцированных фотопроцессах [18]. Среди аналитических подходов наиболее популярным является S -матричный формализм, в рамках которого для точной волновой функции активного электрона в самосогласованном потенциале $U(r)$ используется разложение в формальный ряд по $U(r)$ [19, 20] (см. также [21, 22]). Такое разложение приводит к борновскому ряду для амплитуды перехода, члены которого (парциальные амплитуды перехода) могут быть выражены в виде свертки функции Грина свободного электрона в лазерном поле с атомным потенциалом. В частности, для процесса надпороговой ионизации (НПИ) учет $U(r)$ в низшем порядке приводит к результату Келдыша [23]. Ввиду большой величины классического действия электрона в сильном низкочастотном поле парциальные амплитуды можно анализировать в рамках метода перевала [24], что приводит к подходу квантовых орбит [25, 26]. Этот подход дает наглядную физическую интерпретацию явлений сильного поля на языке классических траекторий, тем самым обосновывая непротиворечивость модели перерасеяния для фундаментальных атомных фотопроцессов в интенсивном лазерном поле [19, 20, 27, 28].

Хотя подход, основанный на борновском разложении амплитуд переходов, является весьма плодотворным и вносит большой вклад в описание явлений сильного поля, он не позволяет точно учитывать атомный потенциал, влияние которого на процессы в сильном поле может иметь решающее значение (см., например, [9, 18, 29–32]). Одним из подходов, позволяющих осуществить более точный учет динамики атомной системы в интенсивном низкочастотном поле, является адиабатическое приближение. Общая идея этого приближения состоит в использовании малости несущей частоты ω лазерного импульса по сравнению с порогом ионизации I_p атомной мишени ($\hbar\omega \ll I_p$). Низший порядок адиабатического приближения (нулевое приближе-

ние) определяется квазистационарным состоянием системы в постоянном поле, напряженность которого равна мгновенной величине низкочастотного лазерного поля [33–37]. В работах [11–17] получена поправка к нулевому адиабатическому приближению для волновой функции, обусловленная перерасеянием электрона на атомном потенциале. В работе [38] дано уточнение адиабатического подхода для определения атомного состояния в низшем адиабатическом приближении, заключающееся в использовании аналитической части волновой функции квазистационарного атомного состояния в мгновенном лазерном поле. В рамках адиабатического подхода были рассчитаны как низкоэнергетические, так и высокоэнергетические (плато перерасеяния) части фотоэлектронных спектров и спектров генерации высоких гармоник (ГВГ) лазерного излучения.

Наличие замкнутого аналитического выражения для волновой функции атомного состояния в интенсивном ИК-поле позволяет развить адиабатическую теорию возмущений по дополнительному взаимодействию с высокочастотным (например, в области вакуумного ультрафиолета — ВУФ) аттосекундным импульсом [17, 39]. Влияние ультракороткого ВУФ-импульса на процесс генерации излучения заключается в появлении значительного числа новых каналов генерации и существенной модификации спектров ГВГ ИК-поля. Например, усиление в выходе гармоник за счет резонансного заселения возбужденных состояний мишени ВУФ-импульсом исследовалось в работах [40–43]. ВУФ-индуцированное усиление в выходе высоких гармоник изучалось как для последовательности аттосекундных импульсов [44–47], так и для изолированного ВУФ-импульса аттосекундной длительности [48, 49]. Эти исследования показали, что ВУФ-импульс (или их последовательность) может влиять на этап ионизации в трехшаговой модели Коркума [50], т. е. изменять времена ионизации, и тем самым влиять на выход гармоник. В [51, 52] было показано, что добавление слабого ВУФ-поля приводит к возникновению дополнительного плато в спектрах ГВГ. Физика возникновения дополнительного ВУФ-индуцированного плато была дана в работе [53], где показано, что дополнительное плато является следствием поглощения ВУФ-фотона на этапе рекомбинации. Отметим также, что при достаточно высокой несущей частоте ВУФ-импульса электроны из внутренней оболочки атома также могут быть задействованы в процессе ГВГ, приводя к увеличению энергии отсечки плато [54–56]. Кроме того, такие ВУФ-импульсы в сочетании с интенсивным ИК-полем позволяют исследовать

довать Оже-процессы [57, 58] и электронные переходы из внутренних оболочек в валентную оболочку [59]. Канал переизлучения (или упругого рассеяния) ВУФ-фотона атомной системой, приводящий к существенному усилению выхода генерируемого излучения, исследовался в [60]. Исследовались также процессы второго порядка по ВУФ-взаимодействию в ИК-модифицированной атомарной среде: генерация ВУФ-импульса на удвоенной несущей частоте [39] и эффект выпрямления ВУФ-импульса [61].

В настоящей работе мы обобщаем предложенный в [17, 39] пертурбативный подход для построения поправок теории возмущений по взаимодействию с коротким ВУФ-импульсом произвольного порядка на основе адиабатических волновых функций атомного состояния в интенсивном ИК-поле. В рамках развитой теории возмущений исследуются ВУФ-индуцированные каналы генерации излучения путем анализа классических траекторий электрона в поле синхронизированных интенсивного ИК- и аттосекундного ВУФ-импульсов, исследуется возможность интерференции различных каналов в результате их спектрального перекрытия. В статье используется атомная система единиц, если не указано иное.

2. АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ АТОМА В НИЗКОЧАСТОТНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

2.1. Адиабатическое выражение для волновой функции

Рассмотрим взаимодействие атомной системы с интенсивным инфракрасным лазерным импульсом с пиковой напряженностью электрического поля F_{IR} и несущей частотой ω_{IR} . Будем полагать, что параметры лазерного импульса удовлетворяют условиям адиабатичности [23]:

$$\omega_{IR} \ll |E_0|, \quad \gamma_K \ll 1. \quad (1)$$

где $\gamma_K = \kappa\omega_{IR}/F_{IR}$ — параметр Келдыша, $\kappa = \sqrt{2|E_0|}$, E_0 — энергия невозмущенного атомного уровня. Условия (1) могут быть также записаны через среднюю энергию колебаний свободного электрона в лазерном поле $u_p = F_{IR}^2/(4\omega_{IR}^2)$:

$$\omega_{IR} \ll |E_0|, \quad \omega_{IR} \ll u_p. \quad (2)$$

Для описания нелинейного взаимодействия атомной системы с лазерным полем, удовлетворяющим условиям (2), наиболее удобно использовать

адиабатический подход [12, 13, 37]. В рамках этого подхода волновая функция атомного электрона, взаимодействующего с низкочастотным лазерным полем, может быть представлена в виде суммы «медленно» ($\Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$) и «быстро» ($\Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t)$) меняющихся во времени частей [11, 12, 17]:

$$\Psi_{IR}(\mathbf{r}, t) = \Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Медленная часть $\Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ является адиабатическим приближением в низшем порядке («нулевое» приближение) и определяется квазистационарным состоянием в постоянном электрическом поле с напряженностью, равной мгновенному значению ИК-поля в момент времени t [12, 37]. В ряде практических вычислений функция $\Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ может быть с хорошей точностью аппроксимирована функцией начального состояния в отсутствии ИК-поля:

$$\Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t) \approx e^{-iE_0 t} \varphi_0(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Слагаемое $\Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t)$ в (3) описывает эффекты перераспределения валентного электрона на атомном осто-ве и представляет собой суперпозицию состояний рассеяния $\psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}$ электрона на атомном потенциале с индуцированными лазерным полем импульсами \mathbf{K}_s [17]:

$$\Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_0 t} \Phi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t), \quad (5a)$$

$$\Phi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t) = \sum_s a_s(t) \psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (5b)$$

Каждое слагаемое в сумме (5b) связано с одной из возможных замкнутых классических траекторий, начинающихся в момент туннелирования t'_s и заканчивающихся в момент времени t возврата электрона к атомному остову. Индуцированные лазерным полем импульсы определены выражением

$$\mathbf{K}_s = \mathbf{K}(t, t'_s), \quad (6)$$

$$\mathbf{K}(t, t') = \mathbf{A}_{IR}(t) - \frac{1}{t - t'} \int_{t'}^t \mathbf{A}_{IR}(\tau) d\tau,$$

где $\mathbf{A}_{IR}(t)$ — векторный потенциал, связанный с напряженностью $\mathbf{F}_{IR}(t)$ электрического поля лазерного импульса соотношением

$$\mathbf{F}_{IR}(t) = -\partial \mathbf{A}_{IR}(t) / \partial t.$$

Времена туннелирования $t'_s(t)$ как функции времени t удовлетворяют трансцендентному уравнению (см. детали в [14]):

$$\mathbf{K}'_s \cdot \dot{\mathbf{K}}'_s = 0, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{K}'_s &\equiv \mathbf{K}'(t, t'_s), \\ \dot{\mathbf{K}}'_s &= \frac{\partial \mathbf{K}'_s}{\partial t'_s}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\mathbf{K}'(t, t') = \mathbf{A}_{IR}(t') - \frac{1}{t - t'} \int_{t'}^t \mathbf{A}_{IR}(\tau) d\tau.$$

Уравнение (7) имеет простой физический смысл: атомный электрон туннелирует в те моменты времени, которые обеспечивают минимум кинетической энергии высвободившегося электрона в лазерном поле. Зависящие от времени коэффициенты $a_s(t)$ в суперпозиции (5b) представляют собой произведение ионизационного (туннельного) $a^{(tun)}(t'_s)$ и пропагационного $a^{(pr)}(t, t'_s)$ множителей:

$$a_s(t) = a^{(tun)}(t'_s) a^{(pr)}(t, t'_s). \quad (9)$$

Ионизационный множитель характеризуется туннельной экспонентой в мгновенном «постоянном» электрическом поле с напряженностью

$$\mathcal{F} = [\mathbf{F}_{IR}^2(t'_s) - \mathbf{K}'_s \cdot \dot{\mathbf{F}}_{IR}(t'_s)]^{1/2},$$

см. [62]. Например, для случая линейно поляризованного лазерного поля имеет место соотношение

$$a^{(tun)}(t'_s) \propto e^{-F_{at}/(3|F_{IR}(t'_s)|)}, \quad (10)$$

где $F_{at} = \kappa^3$ определяет величину характерного внутриатомного поля. Для выполнения условия квазиклассичности необходимо выполнение дополнительного условия $F \ll F_{at}$, которое обеспечивает малость ионизационного множителя и незначительность эффектов распада начального состояния.

Пропагационный множитель $a^{(pr)}(t, t'_s)$ определяется классическим действием $S(t, t'_s)$ свободного электрона в лазерном поле на временном отрезке от t'_s до t :

$$a^{(pr)}(t, t'_s) = \frac{e^{iE_0(t-t'_s) - iS(t, t'_s)}}{(t - t'_s)^{3/2}}, \quad (11a)$$

$$\begin{aligned} S(t, t'_s) &= \frac{1}{2} \int_{t'_s}^t [\mathbf{A}_{IR}(\tau) - \\ &\quad - \frac{1}{t - t'_s} \int_{t'_s}^t \mathbf{A}_{IR}(\tau') d\tau']^2 d\tau. \end{aligned} \quad (11b)$$

Отметим, что перерассеянная часть $\Phi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t)$ волновой функции атомного электрона в ИК-поле

по отношению к невозмущенной функции $\varphi_0(\mathbf{r})$ имеет малость $\sim \beta_{IR}$,

$$\beta_{IR} = \gamma_K^{3/2} \frac{F_{IR}}{F_{at}} e^{-F_{at}/(3F_{IR})} \ll 1.$$

По сути, результат (3) представляет собой разложение состояния атомного электрона по β_{IR} с точностью до первого порядка. В дальнейшем будем сохранять эту точность, тогда как учет более высоких порядков разложения по β_{IR} (т.е. более точный учет эффектов перерассеяния) не приводит к каким-либо заметным проявлениям в амплитудах и сечениях процессов в сильном лазерном ИК-поле.

2.2. Амплитуда генерации излучения

Амплитуда генерации фотона атомом в интенсивном лазерном поле определяется дипольным матричным элементом [63, 64]:

$$\mathbf{D}(\Omega) = \int \langle \tilde{\Psi}_{IR}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \Psi_{IR}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (12)$$

где Ω — частота генерируемого фотона, $\tilde{\Psi}_{IR}(\mathbf{r}, t)$ дуальная волновая функция к состоянию $\Psi_{IR}(\mathbf{r}, t)$, определяемая из состояния $\Psi_{IR}(\mathbf{r}, t)$ посредством комплексного сопряжения, обращения времени $t \rightarrow -t$ и замены все t -нечетных параметров λ на $-\lambda$ [65, 66]. В низкочастотном лазерном поле дипольный матричный элемент (12) для $\Omega > |E_0|$ может быть записан приближенно через $\Psi^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t)$ [17, 63]:

$$\mathbf{D}(\Omega) = \int \langle \varphi_0 e^{-iE_0 t} | \mathbf{r} | \Psi_{IR}^{(r)}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt. \quad (13)$$

Выход гармоник, просуммированный по поляризациям и проинтегрированный по направлениям, определяется квадратом модуля $\mathbf{D}(\Omega)$:

$$Y = \frac{\Omega^4 |\mathbf{D}(\Omega)|^2}{4\pi^2 c^3},$$

где c — скорость света.

В адиабатическом приближении временной интеграл в (13) вычисляется методом перевала, а $\mathbf{D}(\Omega)$ можно представить в виде суммы парциальных амплитуд $\mathbf{D}_j(\Omega)$ [14, 17]:

$$\mathbf{D}(\Omega) = \sum_j \mathbf{D}_j(\Omega), \quad (14a)$$

$$\mathbf{D}_j(\Omega) = a_j^{(tun)} \bar{a}_j \mathbf{d}(\mathbf{K}_j) e^{i\Omega t_j}, \quad (14b)$$

где $a_j^{(tun)}$, \bar{a}_j туннельный и пропагационный множители, а $\mathbf{d}(\mathbf{K}_j)$ дипольный матричный элемент перехода из состояния континуума с импульсом \mathbf{K}_j в связанное состояние $\varphi_0(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{d}(\mathbf{K}_j) = \langle \varphi_0(\mathbf{r}) | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}_j}^{(+)}(\mathbf{r}) \rangle.$$

Факторы $a_j^{(tun)}$, \bar{a}_j определяются соотношениями

$$a_j^{(tun)} \equiv a^{(tun)}(t'_j),$$

$$\bar{a}_j = \sqrt{\frac{2\pi i}{\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{F}_{IR}(t_j) + \frac{\mathbf{K}_j^2}{t_j - t'_j}}} a^{(pr)}(t_j, t'_j).$$

Суммирование в (14а) ведется по всем замкнутым классическим траекториям электрона со временем начала t'_j и окончания t_j движения. Времена t'_j и t_j являются корнями системы трансцендентных уравнений [14, 17]:

$$\mathbf{K}'_j \cdot \dot{\mathbf{K}}'_j = 0, \quad \mathbf{K}_j^2 = 2(\Omega + E_0), \quad (15)$$

где индуцированные импульсы $\mathbf{K}'_j \equiv \mathbf{K}'(t_j, t'_j)$, $\mathbf{K}_j \equiv \mathbf{K}(t_j, t'_j)$ определены в (8) и (6) соответственно.

3. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ АТОМНОЙ СИСТЕМЫ В ИНТЕНСИВНОМ ИК-ПОЛЕ

Рассмотрим атомную систему, взаимодействующую с интенсивным ИК-полем и пертурбативным ВУФ-импульсом. Учет ВУФ-взаимодействия с ИК-модифицированной атомной системой возможен в рамках теории возмущений, построенной на адиабатических волновых функциях атомного электрона в ИК-поле [17]. Взаимодействие с ВУФ-импульсом будем рассматривать в дипольном приближении, соответственно, потенциал $V_{XUV}(\mathbf{r}, t)$ взаимодействия атомного электрона с ВУФ-импульсом имеет вид

$$V_{XUV}(\mathbf{r}, t) = V_+(\mathbf{r}, t)e^{-i\omega_{XUV}t} + V_-(\mathbf{r}, t)e^{i\omega_{XUV}t}, \quad (16)$$

$$V_+(\mathbf{r}, t) = \frac{F_{XUV}}{2}(\mathbf{e}_{XUV} \cdot \mathbf{r})f_{XUV}(t),$$

$$V_-(\mathbf{r}, t) = V_+^*(\mathbf{r}, t),$$

где F_{XUV} — пиковая напряженность, ω_{XUV} — несущая частота, \mathbf{e}_{XUV} — вектор поляризации и $f_{XUV}(t)$ — огибающая ВУФ-импульса. Отметим, что для $\omega_{XUV} > |E_0|$ малым параметром теории возмущений по ВУФ-взаимодействию является величина [67]

$$\beta_{XUV} = \frac{\kappa F_{XUV}}{\omega_{XUV}^2} = 4 \frac{|E_0|^2}{\omega_{XUV}^2} \frac{F_{XUV}}{F_{at}} \ll 1. \quad (17)$$

Поэтому даже в случае соизмеримой с F_{at} напряженности ВУФ-излучения взаимодействие V_{XUV} может быть рассмотрено в рамках теории возмущений [68].

Состояние $\Psi(\mathbf{r}, t)$ атомного электрона в поле синхронизированных ИК- и ВУФ-импульсов запишем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_{IR}(\mathbf{r}, t) + \iint \mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V_{XUV}(\mathbf{r}', t') \Psi_{IR}(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt', \quad (18)$$

где $\mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ — нестационарная (запаздывающая) функция Грина атомного электрона в двухкомпонентном поле. Для функции $\mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ справедливо уравнение Дайсона:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \iint \mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') \times \\ \times V_{XUV}(\mathbf{r}'', t'') \mathcal{G}(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t') d\mathbf{r}'' dt'', \quad (19)$$

где $\mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ — нестационарная (запаздывающая) функция Грина атомного электрона в ИК-поле. Используя соотношения (18) и (19), представим волновую функцию $\Psi(\mathbf{r}, t)$ в виде ряда теории возмущений по V_{XUV} :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (20)$$

где $\Psi_0(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi_{IR}(\mathbf{r}, t)$ — атомное состояние в отсутствие ВУФ-импульса, см. (3), $\Psi_n(\mathbf{r}, t) \sim \beta_{XUV}^n$ — поправки n -го порядка, удовлетворяющие следующему рекуррентному соотношению:

$$\Psi_{n+1}(\mathbf{r}, t) = \iint \mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \times \\ \times V_{XUV}(\mathbf{r}', t') \Psi_n(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt'. \quad (21)$$

Точность адиабатического приближения допускает приближенное вычисление временных интегралов в (21). Основной вклад в значение соответствующих интегралов дают преимущественно слабо пересекающиеся окрестности точек $t' = t$ и $t' = \tilde{t}'_s(t)$, где $\tilde{t}'_s(t)$ — множество седловых точек фазы быстро осциллирующего фактора подынтегральной функции в (21) (эта фаза определяется главным образом классическим действием электрона в ИК-поле и несущей частотой ВУФ-импульса). Асимптотическое выражение для функции Грина $\mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ в окрестности указанных особых точек было получено в работе [17]:

$$\mathcal{G}_{IR}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \approx \begin{cases} G_{at}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'), & t \approx t', \\ G_{vol}(0, t; 0, t') \psi_{\mathbf{K}}^{(+)}(\mathbf{r}) [\psi_{\mathbf{K}'}^{(+)}(\mathbf{r}')]^*, & t \neq t', \end{cases} \quad (22)$$

где $G_{at}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ — нестационарная атомная функция Грина электрона, $G_{\text{vol}}(0, t; 0, t')$ — волковская функция Грина электрона в ИК-поле при $\mathbf{r} = \mathbf{r}' = 0$, импульсы $\mathbf{K} \equiv \mathbf{K}(t, t')$ и $\mathbf{K}' \equiv \mathbf{K}'(t, t')$ определены выражениями (6) и (8) соответственно.

Явное выражение для поправки $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ n -го порядка можно получить последовательным вычислением поправок более низкого порядка, используя соотношения (22) и (21) и приближенно оценивая интегралы по времени. Поправка n -го порядка может быть разбита на медленную $\Psi_n^{(s)}$ и быструю $\Psi_n^{(r)}$ части:

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Psi_n^{(s)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_n^{(r)}(\mathbf{r}, t). \quad (23)$$

Для определения медленной части $\Psi_n^{(s)}$ представим ее в виде суперпозиции

$$\Psi_n^{(s)}(\mathbf{r}, t) \approx \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} \varphi_{\nu}^{(n)}(\mathbf{r}, t), \quad (24)$$

где $E_{\nu} = E_0 + \nu\omega_{XUV}$, а медленные функции времени $\varphi_{\nu}^{(n)}(\mathbf{r}, t)$ требуют определения. Медленную временную зависимость функций $\varphi_{\nu}^{(n)}(\mathbf{r}, t)$, а также огибающей $f_{XUV}(t)$ будем понимать в рамках следующих условий:

$$\left| \frac{\partial \varphi_{\nu}^{(n)}}{\partial t} \right| \ll \omega_{XUV} |\varphi_{\nu}^{(n)}|, \quad (25a)$$

$$\left| \frac{\partial f_{XUV}(t)}{\partial t} \right| \ll \omega_{XUV} |f_{XUV}(t)|. \quad (25b)$$

Подчеркнем, что для выделения медленно меняющейся во времени части волновой функции следует пренебречь вкладом окрестностей седловых точек $\tilde{t}'_s(t)$ во временной интеграл в (21) и учесть только окрестность предельной точки $t' \approx t$. Подставляя (24) в (21) и пользуясь асимптотикой функции Грина для $t' \rightarrow t$ (см. соотношение (22)), получим

$$\sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} \varphi_{\nu}^{(n+1)}(\mathbf{r}, t) = \iint G_{at}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \times \\ \times V_{XUV}(\mathbf{r}', t') \sum_{\nu'} e^{-iE_{\nu'}t'} \varphi_{\nu'}^{(n)}(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt'. \quad (26)$$

Далее, аппроксимируя в правой части уравнения (26) медленные функции $\varphi_{\nu}^{(n)}(\mathbf{r}', t')$ своими значениями при $t' = t$ и используя связь между стационарной и нестационарной атомной функцией Грина:

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int e^{iE(t-t')} G_{at}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') dt', \quad (27)$$

получим

$$\sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} \varphi_{\nu}^{(n+1)}(\mathbf{r}, t) = \\ = \sum_{\nu'} e^{-iE_{\nu'+1}t} G_{E_{\nu'+1}} V_+ |\varphi_{\nu'}^{(n)}\rangle + \\ + \sum_{\nu'} e^{-iE_{\nu'-1}t} G_{E_{\nu'-1}} V_- |\varphi_{\nu'}^{(n)}\rangle. \quad (28)$$

Отметим, что если энергия функции Грина совпадает с энергией основного состояния, то, как следует из общей теории возмущений, функция Грина заменяется на редуцированную функцию Грина G'_{E_0} [69, 70],

$$G'_{E_0} = \lim_{E \rightarrow E_0} \left[G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{\varphi_0^*(\mathbf{r}') \varphi_0(\mathbf{r})}{E - E_0} \right]. \quad (29)$$

Учитывая слабую зависимость функций $\varphi_{\nu'}^{(n)}$ и V_{\pm} от времени [см. (25)], приравняем коэффициенты при «быстро осциллирующих» экспонентах с одинаковыми показателями в (28) и получим уравнение для функций $\varphi_{\nu}^{(n+1)}$:

$$\varphi_{\nu}^{(n+1)} = \begin{cases} G_{E_{\nu}} V_+ |\varphi_{\nu-1}^{(n)}\rangle + G_{E_{\nu}} V_- |\varphi_{\nu+1}^{(n)}\rangle, & \nu \neq 0, \\ G'_{E_0} V_+ |\varphi_{-1}^{(n)}\rangle + G'_{E_0} V_- |\varphi_{+1}^{(n)}\rangle, & \nu = 0. \end{cases} \quad (30)$$

Итерационный метод решения уравнения (30) предполагает наличие следующего выражения для нулевой итерации:

$$\varphi_{\nu}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}) \delta_{\nu,0}. \quad (31)$$

Таким образом, используя соотношения (24) и (30), можно найти поправку n -го порядка для медленной части волновой функции, которая формально будет совпадать с выражением для n -го порядка теории возмущений в монохроматическом поле [70] (для монохроматического поля $f_{XUV}(t) \equiv 1$, т.е. V_{\pm} не зависят от времени). Запишем $\Psi_n^{(s)}$ в n -ом порядке теории возмущений с помощью интегрального оператора \hat{P}_n :

$$\Psi_n^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \hat{P}_n(E_0, t) |\varphi_0\rangle, \quad (32)$$

который представляет собой свертку атомной функции Грина со всеми возможными комбинациями n операторов V_+ и/или V_- . Приведем явный вид операторов \hat{P}_n для первых трех порядков теории возмущений ($n \leq 3$):

$$\begin{aligned}
\hat{P}_0(E_0, t) &= e^{-iE_0 t} \hat{I}, \\
\hat{P}_1(E_0, t) &= e^{-iE_1 t} G_{E_1} V_+ + e^{-iE_{-1} t} G_{E_{-1}} V_-, \\
\hat{P}_2(E_0, t) &= e^{-iE_2 t} G_{E_2} V_+ G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_0 t} G'_{E_0} V_- G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_0 t} G'_{E_0} V_+ G_{E_{-1}} V_- + \\
&\quad + e^{-iE_{-2} t} G_{E_{-2}} V_- G_{E_{-1}} V_-, \\
\hat{P}_3(E_0, t) &= e^{-iE_3 t} G_{E_3} V_+ G_{E_2} V_+ G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_1 t} G_{E_1} V_- G_{E_2} V_+ G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_1 t} G_{E_1} V_+ G'_{E_0} V_- G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_1 t} G_{E_1} V_+ G'_{E_0} V_+ G_{E_{-1}} V_- + \\
&\quad + e^{-iE_{-1} t} G_{E_{-1}} V_- G'_{E_0} V_- G_{E_1} V_+ + \\
&\quad + e^{-iE_{-1} t} G_{E_{-1}} V_- G'_{E_0} V_+ G_{E_{-1}} V_- + \\
&\quad + e^{-iE_{-1} t} G_{E_{-1}} V_+ G_{E_{-2}} V_- G_{E_{-1}} V_- + \\
&\quad + e^{-iE_{-3} t} G_{E_{-3}} V_- G_{E_{-2}} V_- G_{E_{-1}} V_-,
\end{aligned}$$

где \hat{I} — единичный оператор. Очевидно, что медленная часть волновой функции есть сумма парциальных слагаемых $\Psi_n^{(s)}(\mathbf{r}, t)$:

$$\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{P}_n(E_0, t) \varphi_0(\mathbf{r}). \quad (33)$$

Заслуживает внимания схожесть полученного ряда теории возмущений по ВУФ-взаимодействию для волновой функции атомной системы в интенсивном ИК-поле с известным результатом теории возмущений для квазистационарного состояния атома в пертурбативном монохроматическом лазерном поле, полученном в рамках метода квазистационарных квазиэнергетических состояний (ККЭС) [70]: ряд (33) формально совпадает с результатом для ККЭС после замены точной квазиэнергии ККЭС ϵ на энергию основного состояния E_0 и напряженности поля F_{XUV} на мгновенную амплитуду импульсного поля $\mathcal{F}_{XUV}(t) = F_{XUV} f_{XUV}(t)$. Таким образом, если известна функциональная зависимость волновой функции ККЭС $\Psi_{XUV}^{(QQES)}(\mathbf{r}, t; \epsilon, F_{XUV})$ от квазиэнергии и напряженности поля, то такая же зависимость определяет функцию $\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t)$:

$$\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \Psi_{XUV}^{(QQES)}(\mathbf{r}, t; E_0, \mathcal{F}_{XUV}(t)). \quad (34)$$

В отличие от медленной части, временная зависимость быстрой части ($\Psi_n^{(r)}(\mathbf{r}, t)$) определяется быстро осциллирующей экспоненциальной зависимостью $\sim e^{-iS}$, задаваемой классическим действием S электрона в ИК-поле вдоль замкнутых траекторий (см. (5b), (9) и (11a)). Отметим, что в рамках используемого адиабатического приближения возникновение любых произведений двух и бо-

лее волковских функций Грина приводит к превышению точности, и поэтому в любом порядке теории возмущений по ВУФ-взаимодействию выражение для $\Psi_n^{(r)}(\mathbf{r}, t)$ содержит только одну волковскую функцию Грина. Из соотношения (21) следует, что $\Psi_n^{(r)}(\mathbf{r}, t)$ определяется как результат свертки или медленной части $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ с функцией Грина \mathcal{G}_{IR} , аппроксимируемой волковской функцией Грина (см. соотношение (22)), или быстрой части $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ с функцией Грина \mathcal{G}_{IR} , аппроксимируемой атомной функцией Грина (см. соотношение (22)):

$$\begin{aligned}
\Psi_{n+1}^{(r)}(\mathbf{r}, t) &= \\
&= \int G_{\text{vol}}(0, t; 0, t') \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | V_{XUV}(t') | \Psi_n^{(s)}(t') \rangle \psi_{\mathbf{K}}^{(+)}(\mathbf{r}) dt' + \\
&\quad + \iint G_{at}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V_{XUV}(\mathbf{r}', t') \Psi_n^{(r)}(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt', \quad (35)
\end{aligned}$$

где первый интеграл предполагает приближенное вычисление методом перевала, а второй интеграл должен быть оценен, учитывая только вклад окрестности $t' \approx t$. Соответственно, $\Psi_{n+1}^{(r)}$ можно записать в виде суммы двух слагаемых:

$$\Psi_{n+1}^{(r)} = \Psi_{n+1}^{(r,1)} + \Psi_{n+1}^{(r,2)}, \quad (36)$$

где выражения для $\Psi_{n+1}^{(r,1)}$, $\Psi_{n+1}^{(r,2)}$ обсуждаются ниже.

Будем использовать приближенное выражение (24) для функции $\Psi_n^{(s)}$ в первом интеграле в (35), после чего выполним интегрирование по t' методом перевала. В результате получим выражение для $\Psi_{n+1}^{(r,1)}$:

$$\begin{aligned}
\Psi_{n+1}^{(r,1)}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\nu} \sum_{\tilde{t}'} \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)}(\mathbf{r}) \mathcal{G}_{\nu}(t, \tilde{t}') \times \\
&\quad \times \left[\langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') | \varphi_{\nu-1}^{(n)} \rangle + \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | V_-(\tilde{t}') | \varphi_{\nu+1}^{(n)} \rangle \right], \quad (37)
\end{aligned}$$

где $\tilde{\mathbf{K}}' = \mathbf{K}'(t, \tilde{t}')$, $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K}(t, \tilde{t}')$, а суммирование ведется по всем допустимым значениям ν той же четности, что и $n+1$ в интервале $|\nu| \leq n+1$, и перевальным точкам $\tilde{t}' \equiv \tilde{t}'(t)$ (точкам стационарной фазы), определяемым из уравнения

$$\tilde{\mathbf{K}}'^2 = 2E_{\nu}. \quad (38)$$

В (37) используется обозначение

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{\nu}(t, \tilde{t}') &= -\frac{e^{-iS(t, \tilde{t}') - iE_{\nu} \tilde{t}'}}{2\pi(t - \tilde{t}')^{3/2}} \times \\
&\quad \times \left[\tilde{\mathbf{K}}' \cdot \mathbf{F}_{IR}(\tilde{t}') - 2E_{\nu}/(t - \tilde{t}') \right]^{-1/2}. \quad (39)
\end{aligned}$$

Точность приближенного выражения для функции Грина в (22) подразумевает, что в сумме (37) учитываются только такие ν , которые обеспечивают решение уравнения (38) в действительных числах.

Из выражения (37) видно, что поправка $\Psi_{n+1}^{(r,1)}$ к быстрой части волновой функции описывает состояние перерассеяния, формирующегося в рамках трехшагового сценария:

1) на первом этапе в результате поглощения или испускания n ВУФ-фотонов атомной системой формируются состояния $\varphi_\nu^{(n)}$;

2) на втором этапе из одного из состояний $\varphi_\nu^{(n)}$ происходит вынужденный однофотонный переход (с поглощением или испусканием фотона) в момент времени \tilde{t}' в состояние непрерывного спектра с асимптотическим импульсом $\tilde{\mathbf{K}}'$;

3) на третьем этапе, находясь в континууме, электрон взаимодействует с интенсивным ИК-полем и формирует в момент времени t состояние $\psi_{\mathbf{K}}^{(+)}(\mathbf{r})$ посредством набора энергии при движении вдоль замкнутой классической траектории. Распространение электронного пакета в континууме описывается множителем $\mathcal{G}_\nu(t, \tilde{t}')$.

Как следует из соотношений (5b) и (37), быстрая часть волновой функции задается быстро осциллирующим фактором $e^{-iS(t, \tilde{t}')}$, который определяет ИК-управляемое распространение электрона в континууме, и функцией непрерывного спектра $\psi_{\mathbf{K}}^{(+)}$. Те же компоненты определяют поправку $\Psi_n^{(r,2)}$, поэтому без ограничения общности представим $\Psi_n^{(r,2)}$ в виде

$$\Psi_n^{(r,2)} = \sum_s \hat{a}_s^{(n)}(t) |\psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}\rangle, \quad (40)$$

где $\hat{a}_s^{(n)}(t) \propto e^{-iS(t, \tilde{t}'_s)}$ — некоторый интегральный оператор, а суммирование выполняется по всем действительным моментам ионизации \tilde{t}'_s , индуцированной ИК- или ВУФ-полем. В нулевом приближении по ВУФ-взаимодействию $\tilde{t}'_s \equiv t'_s$ (см. соотношение (7)), а $\hat{a}_s^{(0)} \equiv a_s(t) \hat{I}$ (см. соотношение (9)). Стоит отметить, что оператор $\hat{a}_s^{(n)}(t)$ может определяться двумя слагаемыми (обозначаемыми ниже индексами а и б), описывающими два различных сценария взаимодействия электрона с ИК- и ВУФ-импульсами:

а) атомный электрон туннелирует в ИК-модифицированный континуум и далее, распространяясь вдоль замкнутых классических траекторий в ИК-поле, поглощает ν и излучает $n - \nu$ ВУФ-фотонов (четность n и ν одинакова);

б) атомный электрон переходит в ИК-модифицированный континуум с энергией $E_{\nu'}$ путем поглощения ν' ВУФ-фотонов, где в процессе распространения вдоль замкнутых классических траекторий в ИК-поле поглощает $\nu - \nu'$ и излучает $n - \nu$ ВУФ-фотонов. В соответствии с описанными

механизмами представим функцию $\Psi_n^{(r,2)}$ в виде суммы:

$$\Psi_n^{(r,2)} = \Psi_n^{(r,2a)} + \Psi_n^{(r,2b)}. \quad (41)$$

Математическое выражение для оператора $\hat{a}_s^{(n)}(t)$, соответствующего реализации сценария (а), можно легко получить из (35) (см. второе интегральное слагаемое в правой части), полагая, что «нулевая итерация» $\Psi_0^{(r)} = \Psi_{IR}^{(r)}$ для быстрой части волновой функции определена в (5). Последовательно вычисляя временные интегралы в (35) и учитывая вклад окрестности предельной точки $t' = t$, получим общее выражение для $\Psi_n^{(r,2a)}(\mathbf{r}, t)$:

$$\Psi_n^{(r,2a)}(\mathbf{r}, t) = \sum_s a_s(t) \hat{P}_n \left(\frac{\mathbf{K}_s^2}{2}, t \right) \psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}(\mathbf{r}), \quad (42)$$

где суммирование включает все решения уравнения (7). Отметим, что аналогично выше рассмотренному случаю функции $\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t)$ суммирование ряда теории возмущений по n с учетом явного вида (42) приводит к результату, формально совпадающему с выражением для квазиэнергетического состояния рассеяния $\Psi_{\mathbf{K}}^{(+)}(\mathbf{r}, t; \epsilon, \mathcal{F}_{XUV}(t))$ атомного электрона в монохроматическом ВУФ-поле [70] с квазиэнергией $\epsilon = \mathbf{K}_s^2/2$, асимптотическим импульсом $\mathbf{K} = \mathbf{K}_s$ и напряженностью ВУФ-поля, равной мгновенной величине $\mathcal{F}_{XUV}(t)$:

$$\begin{aligned} \sum_n \hat{P}_n \left(\frac{\mathbf{K}_s^2}{2}, t \right) \psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)} \left(\mathbf{r}, t; \frac{\mathbf{K}_s^2}{2}, \mathcal{F}_{XUV}(t) \right) \equiv \Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (43)$$

и следовательно,

$$\Psi^{(r,2a)}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \Psi_n^{(r,2a)}(\mathbf{r}, t) = \sum_s a_s(t) \Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}(\mathbf{r}, t). \quad (44)$$

Поправка $\Psi_n^{(r,2b)}$ к быстрой части волновой функции, отвечающая за реализацию сценария (б), возникает во втором и более высоких порядках теории возмущений. В качестве «нулевой итерации» для получения данной поправки служит слагаемое $\Psi_1^{(r,1)}$ ($\Psi_0^{(r)} = \Psi_1^{(r,1)}$), соответствующее поглощению ВУФ-фотона (см. первое слагаемое в квадратных скобках в (37)):

$$\Psi_0^{(r)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\tilde{t}'} \psi_{\tilde{\mathbf{K}}}^{(+)}(\mathbf{r}) \mathcal{G}_1(t, \tilde{t}') \langle \psi_{\tilde{\mathbf{K}}}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') | \varphi_0 \rangle, \quad (45)$$

где \tilde{t}' определяется из уравнения (38) с $\nu = 1$. Подставляя (45) во второе слагаемое в (35) и вычисляя временной интеграл в окрестности $t' \approx t$, получим искомую поправку во втором порядке теории возмущений:

$$\Psi_2^{(r,2b)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\tilde{t}'} \hat{P}_1 \left(\frac{\tilde{\mathbf{K}}^2}{2}, t \right) \psi_{\tilde{\mathbf{K}}}^{(+)}(\mathbf{r}) \times \mathcal{G}_1(t, \tilde{t}') \langle \psi_{\tilde{\mathbf{K}}'}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') | \varphi_0 \rangle. \quad (46)$$

Соотношению (46) легко придать прозрачный физический смысл: электрон, находясь в связанном состоянии, поглощает ВУФ-фотон и переходит в состояние непрерывного спектра с асимптотическим импульсом $\tilde{\mathbf{K}}'$ (чему соответствует матричный элемент $\langle \psi_{\tilde{\mathbf{K}}'}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') | \varphi_0 \rangle$ в (46)), затем распространяется в ИК-модифицированном континууме вдоль замкнутой траектории (см. множитель $\mathcal{G}_1(t, \tilde{t}')$), в результате чего формирует в момент времени t состояние непрерывного спектра посредством однофотонного канала взаимодействия с ВУФ-излучением (т. е. поглощая или испуская ВУФ-фотон).

В третьем порядке теории возмущений вычисления производятся аналогично, и соответствующая поправка имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_3^{(r,2b)}(\mathbf{r}, t) = & \sum_{\tilde{t}'(\nu=1)} \hat{P}_2 \left(\frac{\tilde{\mathbf{K}}^2}{2}, t \right) \psi_{\tilde{\mathbf{K}}}^{(+)}(\mathbf{r}) \times \\ & \times \mathcal{G}_1(t, \tilde{t}') \langle \psi_{\tilde{\mathbf{K}}'}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') | \varphi_0 \rangle + \\ & + \sum_{\tilde{t}'(\nu=2)} \hat{P}_1 \left(\frac{\tilde{\mathbf{K}}^2}{2}, t \right) \psi_{\tilde{\mathbf{K}}}^{(+)}(\mathbf{r}) \times \\ & \times \mathcal{G}_2(t, \tilde{t}') \langle \psi_{\tilde{\mathbf{K}}'}^{(+)} | V_+(\tilde{t}') G_{E_1} V_+(\tilde{t}') | \varphi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (47)$$

где времена \tilde{t}' для первой (второй) суммы находятся из уравнения (38) для $\nu = 1$ ($\nu = 2$). Интерпретация первой суммы в (47) аналогична приведенной для соотношения (46) за исключением того, что на последнем этапе состояние непрерывного спектра формируется посредством двухфотонного взаимодействия с ВУФ-излучением. Парциальные слагаемые во второй сумме отражают следующий физический механизм: связанный электрон после поглощения двух фотонов переходит в состояние непрерывного спектра, где под действием ИК-поля распространяется вдоль замкнутой траектории и формирует состояние континуума посредством однофотонного канала взаимодействия с ВУФ-излучением. Отметим, что хотя нахождение поправок более высокого порядка не представляет каких-либо трудностей, в настоящей работе они не рассматриваются ввиду громоздкости итоговых выражений.

4. ГЕНЕРАЦИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМОМ В СИНХРОНИЗИРОВАННЫХ ИК- И ВУФ-ИМПУЛЬСАХ

4.1. Каналы генерации

Воспользуемся полученными соотношениями для волновой функции, чтобы определить амплитуду генерации излучения атомом в поле синхронизированных, линейно поляризованных в одном направлении ИК- и ВУФ-импульсов:

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_{IR}(t) + \mathbf{F}_{XUV}(t - \tau), \quad (48)$$

где τ — время задержки между импульсами, определяемая как временной интервал между максимумами их огибающих. Амплитуда генерации излучения дается соотношением (12) с заменой

$$\Psi_{IR}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \tilde{\Psi}_{IR}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t),$$

где $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ — дуальная волновая функция, определяемая из $\Psi(\mathbf{r}, t)$ по той же процедуре, что и $\tilde{\Psi}_{IR}(\mathbf{r}, t)$ (см. обсуждение ниже соотношения (12)).

Как мы показали в предыдущем разделе, функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ представляется суммой «медленной» ($\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t)$) и «быстрой» ($\Psi^{(r)}(\mathbf{r}, t)$) составляющих. Соответственно, амплитуда генерации излучения может быть представлена в виде

$$\mathcal{D}(\Omega) = \mathcal{D}^{(s)}(\Omega) + \mathcal{D}^{(r)}(\Omega) + \tilde{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega) + \hat{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega), \quad (49a)$$

$$\mathcal{D}^{(s)}(\Omega) = \int \langle \tilde{\Psi}^{(s)}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (49b)$$

$$\mathcal{D}^{(r)}(\Omega) = \int \langle \tilde{\Psi}^{(s)}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \Psi^{(r)}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (49c)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega) = \int \langle \tilde{\Psi}^{(r)}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (49d)$$

$$\hat{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega) = \int \langle \tilde{\Psi}^{(r)}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \Psi^{(r)}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\Omega t} dt, \quad (49e)$$

где каждый член детально обсуждается ниже.

«Медленное» слагаемое $\mathcal{D}^{(s)}(\Omega)$ описывает генерацию гармоник ВУФ-поля атомной системой. Принимая во внимание, что $\Psi^{(s)}(\mathbf{r}, t)$ определяется рядом теории возмущений (см. соотношения (33) и (34)), очевидно, $\mathcal{D}^{(s)}(\Omega)$ можно выразить через нелинейные восприимчивости $\chi_n(\omega_{XUV})$ на частотах генерируемых гармоник:

$$\mathcal{D}^{(s)}(\Omega) = e^{i\Omega\tau} \sum_n \chi_n(\omega_{XUV}) F_{XUV}^n f_n(\Omega), \quad (50)$$

$$f_n(\Omega) = \frac{1}{2^n} \int_{-\infty}^{\infty} f_{XUV}^n(t) e^{i\Omega t} dt. \quad (51)$$

Стоит отметить, что в силу правил дипольного отбора для центрально симметричных систем нелинейные восприимчивости $\chi_n(\omega_{XUV})$ для четных n обращаются в ноль. Однако, если учесть более точно эффекты ИК-поля в нулевом приближении $\Psi_{IR}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$, то можно показать, что восприимчивости $\chi_n(\omega_{XUV})$ должны быть заменены на обобщенные нелинейные восприимчивости атомной системы в постоянном электрическом поле с напряженностью, соответствующей ИК-импульсу в момент времени задержки τ :

$$\chi_n(\omega_{XUV}) \rightarrow \chi_n^{(DC)}(\omega_{XUV}; \mathcal{F}_{DC} = F_{IR}(\tau)). \quad (52)$$

В этом случае запрет на генерацию четных гармоник снимается, и в спектре генерируемого излучения наблюдаются пики соответствующие частотам $N\omega_{XUV}$, где N — целое число (см., например, [39]).

Рассмотрим «быстрое» слагаемое $\mathcal{D}^{(r)}(\Omega)$ в (49). Учитывая, что быстрая часть волновой функции в синхронизированных ИК- и ВУФ-импульсах есть сумма двух слагаемых (см. (36)), запишем $\mathcal{D}^{(r)}(\Omega)$ в виде

$$\mathcal{D}^{(r)}(\Omega) = \mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega) + \mathcal{D}^{(r,2)}(\Omega), \quad (53)$$

где $\mathcal{D}^{(r,i)}(\Omega)$ ($i = 1, 2$) определяется соответствующей поправкой для быстрой части волновой функции. Используя соотношения (32), (37), получим $\mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega)$ в виде

$$\mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega) = \int \mathcal{D}^{(r,1)}(t) e^{i\Omega t} dt, \quad (54a)$$

$$\mathcal{D}^{(r,1)}(t) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \sum_{\tilde{t}'} M_{\nu}(\tilde{t}') \mathcal{G}_{\nu} \langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}}^{(+)} \rangle, \quad (54b)$$

$$|\tilde{\Psi}^{(s)}\rangle = \sum_{\nu} [\hat{P}_{\nu}(E_0, -t) \varphi_0]^*, \quad (54c)$$

где $\mathcal{G}_{\nu} \equiv \mathcal{G}_{\nu}(t, \tilde{t}')$ определено в (39), времена \tilde{t}' — корни уравнения (38), и $M_{\nu}(\tilde{t}')$ — сумма матричных элементов, описывающих ν -фотонное ВУФ-индуцированное возбуждение атомной системы из начального состояния φ_0 в состояние континуума $\psi_{\mathbf{K}'}^{(+)}$ с учетом каналов переизлучения. Явный вид $M_{\nu}(\tilde{t}')$ может быть определен в рамках теории возмущений с использованием рекуррентного соотношения (30):

$$\begin{aligned} M_1(\tilde{t}') &= \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | \tilde{V}_+ | \varphi_0 \rangle + \\ &+ \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | \tilde{V}_+ G_{E_0}' \tilde{V}_- G_{E_0+\omega_{XUV}} \tilde{V}_+ | \varphi_0 \rangle + \dots, \\ M_2(\tilde{t}') &= \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | \tilde{V}_+ G_{E_0+\omega_{XUV}} \tilde{V}_+ | \varphi_0 \rangle + \dots \\ M_3(\tilde{t}') &= \langle \psi_{\mathbf{K}'}^{(+)} | \tilde{V}_+ G_{E_0+2\omega_{XUV}} \tilde{V}_+ G_{E_0+\omega_{XUV}} \tilde{V}_+ | \varphi_0 \rangle + \dots, \end{aligned}$$

где $\tilde{V}_{\pm} \equiv V_{\pm}(\mathbf{r}, \tilde{t}')$ (заметим, что для случая линейно-поляризованного ВУФ-импульса $\tilde{V}_+ = \tilde{V}_-$). Третий множитель в (54b) (матричный элемент $\langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}}^{(+)} \rangle$) определяет амплитуду рекомбинации в атомное состояние в поле ВУФ-импульса в момент времени t (см. выражение (34)).

Функция $\mathcal{D}^{(r,1)}(t)$ быстро меняется с изменением времени t из-за наличия в \mathcal{G}_{ν} быстро осциллирующего фактора $e^{-iS(t, \tilde{t}')}$. Учитывая, что временной интервал между ионизацией и рекомбинацией (т.е. время распространения электрона в континууме под действием ИК-поля) имеет порядок периода ИК-поля ($|\tilde{t} - \tilde{t}'| \sim T_{IR}$), ионизация и рекомбинация не могут происходить на протяжении длительности \mathcal{T}_{XUV} аттосекундного ВУФ-импульса ($\mathcal{T}_{XUV} \ll T_{IR}$). Это обстоятельство позволяет опустить в сумме по ν в (54c) все слагаемые за исключением $\nu = 0$, а амплитуду рекомбинации $\langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}}^{(+)} \rangle$ записать в низшем по F_{XUV} приближении (т.е. полагая $F_{XUV} = 0$ для состояния $\tilde{\Psi}^{(s)}$):

$$\langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}}^{(+)} \rangle \approx e^{iE_0 t} \langle \varphi_0 | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{K}}^{(+)} \rangle. \quad (55)$$

Оценка интеграла (54a) методом стационарной фазы приводит к результату

$$\mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega) = \sum_{\tilde{t}} \mathcal{D}^{(r,1)}(\tilde{t}) e^{i\Omega \tilde{t}}, \quad (56)$$

где суммирование выполняется по всем временам, удовлетворяющим уравнению

$$\frac{\tilde{K}^2}{2} = \Omega + E_0, \quad \tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K}(\tilde{t}, \tilde{t}'), \quad (57)$$

при решении которого следует учесть неявно заданную зависимость $\tilde{t}' = \tilde{t}'(\tilde{t})$ согласно уравнению (38). Исходя из полученных аналитических соотношений, нетрудно дать физическую интерпретацию механизму генерации излучения, описываемому $\mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega)$: атомный электрон, поглощая ν фотонов ВУФ-поля, переходит в континуум, в котором он распространяется вдоль замкнутой траектории под действием интенсивного ИК-поля. В момент возврата к атомному остову набранная электроном энергия испускается в виде кванта с частотой Ω посредством рекомбинации в основное состояние. Описанный механизм генерации будем называть ВУФ-ионизационным каналом генерации (в англоязычной литературе «XUV-initiated HHG channel») [44, 46, 71–73].

Представим дипольный момент $\mathcal{D}^{(r,2)}(\Omega)$, определяемый волновой функцией $\Psi^{(r,2)}$, в виде суммы

$$\mathcal{D}^{(r,2)}(\Omega) = \mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega) + \mathcal{D}^{(r,2b)}(\Omega), \quad (58)$$

где парциальные дипольные моменты $\mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega)$ и $\mathcal{D}^{(r,2b)}(\Omega)$ соответствуют поправкам $\Psi^{(r,2a)}$ и $\Psi^{(r,2b)}$ быстрой части волновой функции (см. обсуждение выражения (41)). С учетом (42), запишем $\mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega)$ в виде

$$\mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega) = \int \mathcal{D}^{(r,2a)}(t) e^{i\Omega t}, \quad (59a)$$

$$\mathcal{D}^{(r,2a)}(t) = \sum_s a_s(t) \langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)} \rangle, \quad (59b)$$

где $\Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)}$ определено соотношением (43). Учитывая определение дуальной функции $\tilde{\Psi}^{(s)}$, построенной из $\Psi^{(s)}$ (см. соотношение (34)), запишем матричный элемент в (59b) в виде

$$\langle \tilde{\Psi}^{(s)} | \mathbf{r} | \Psi_{\mathbf{K}_s}^{(+)} \rangle \approx \sum_n \mathcal{A}_n^{(\text{rec})} f_{XUV}^n(t) e^{-in\omega_{XUV}t}, \quad (60)$$

где $\mathcal{A}_n^{(\text{rec})} \propto F_{XUV}^n$ — амплитуда фоторекомбинации с поглощением ($n > 0$) или испусканием ($n < 0$) n -фотонов ВУФ-поля. Поскольку функция $a_s(t)$ является быстро осциллирующей, интеграл в (59a) можно оценить методом перевала. В результате для $\mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega)$ получим

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega) &= \sum_{n,s} a_s(t_s) \mathcal{A}_n^{(\text{rec})} \times \\ &\times f_{XUV}^n(t_s - \tau) e^{i(\Omega - n\omega_{XUV})t_s}, \end{aligned} \quad (61)$$

где времена рекомбинации t_s находятся из перевального уравнения

$$\frac{\mathbf{K}^2(t_s, t'(t_s))}{2} = \Omega + E_0 - n\omega_{XUV}, \quad (62)$$

а соответствующие времена ионизации $t'(t_s)$ удовлетворяют уравнению (7) при подстановке в него $t = t_s$. В дальнейшем будем нумеровать возможные пары решений системы уравнений (7) и (62) одним индексом s : (t_s, t'_s) . Аналитическое соотношение (61) позволяет дать простую квазиклассическую интерпретацию механизму генерации излучения, описываемому слагаемым $\mathcal{D}^{(r,2a)}(\Omega)$: в момент времени t'_s связанный электрон туннелирует и распространяется вдоль замкнутой траектории до момента рекомбинации t_s . Рекомбинация происходит с испусканием фотона с частотой Ω при одновременном поглощении n -фотонов ВУФ-поля. Более того, огибающая ВУФ-импульса выступает в роли «временного сепаратора», отсекая те моменты рекомбинации для которых разность $|t_s - \tau|$ больше длительности ВУФ-импульса. Данный механизм генерации излучения определяет так называемый ВУФ-рекомбинационный канал генерации (в

английской литературе «XUV-assisted recombination HHG channel») [52, 53].

Покажем теперь, что оставшиеся слагаемые $\mathcal{D}^{(r,2b)}(\Omega)$, $\tilde{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega)$ и $\hat{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega)$ пренебрежимо малы. Расчет парциального дипольного момента $\mathcal{D}^{(r,2b)}(\Omega)$ с использованием соотношений (46), (47) и (33) показывает, что он определяется членами, которые были отброшены при анализе $\mathcal{D}^{(r,1)}(\Omega)$. В частности, матричный элемент дипольного перехода между $\Psi_2^{(r,2b)}$ и $\Psi^{(s)}$ имеет второй порядок по F_{XUV} и определяет линейную ($\propto F_{XUV}$) поправку к дипольному моменту в однофотонном ВУФ-ионизационном канале генерации излучения посредством учета ВУФ-взаимодействия на этапе рекомбинации (т.е. включает в себя наряду с ВУФ-ионизационным также однофотонный ВУФ-рекомбинационный канал). Аналогично можно показать, что $\Psi_3^{(r,2b)}$ дает поправку $\propto F_{XUV}^2$ к однофотонному ВУФ-ионизационному каналу за счет двухфотонного взаимодействия в ВУФ-рекомбинационном канале, а также поправку $\propto F_{XUV}$ к двухфотонному ВУФ-ионизационному каналу посредством однофотонного ВУФ-рекомбинационного механизма. Указанные поправки следует опустить из-за существенной разницы во временных масштабах между динамикой взаимодействия атомного электрона с ИК- и аттосекундным ВУФ-импульсами: характерный временной масштаб между последовательными процессами ионизации и рекомбинации сопоставим с периодом ИК-поля, ввиду чего этапы ионизации и рекомбинации не могут произойти в рамках длительности одного аттосекундного ВУФ-импульса.

Для оценки вклада дипольного момента $\tilde{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega)$, определенного выражением (49d), заметим, что он описывает инвертированный во времени процесс по отношению к рассмотренным выше каналам генерации для слагаемого $\mathcal{D}^{(r)}(\Omega)$, что непосредственно следует из определения дуальной волновой функции. Так, например, генерация излучения в ВУФ-рекомбинационном канале для $\tilde{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega)$ происходит в рамках следующего сценария: связанный электрон испускает излучение на частоте Ω , которое сопровождается одновременным поглощением n ВУФ-фотонов, в результате чего электрон переходит в виртуальное состояние с большей по абсолютной величине отрицательной энергией и возвращается в начальное состояние, взаимодействуя с интенсивным ИК-полем. Так как все этапы формирования излучения происходят при отрицательной

энергии, то в рамках квазиклассического приближения указанный механизм сильно подавлен и его вклад пренебрежимо мал (см., например, обсуждение в [63]). Используя аналогичные рассуждения для ВУФ-ионизационного канала генерации, приходим к выводу, что им можно пренебречь.

Наконец, слагаемое $\hat{\mathcal{D}}^{(r)}(\Omega)$ также должно быть опущено в нашем рассмотрении, так как оно определяется произведением двух быстрых частей волновой функции, и его учет приводит к превышению точности, установленной в настоящем анализе.

Таким образом, мы показали, что генерация излучения атомной системой, взаимодействующей и интенсивным ИК-излучением и аттосекундным ВУФ-импульсом, длительность которого много меньше, чем период ИК-поля, может происходить в рамках трех каналов: 1) генерация гармоник ВУФ-поля, определяемая соответствующими атомными нелинейными восприимчивостями; 2) ВУФ-ионизационный канал генерации; 3) ВУФ-рекомбинационный канал генерации.

4.2. Вклад различных каналов генерации излучения

Рассмотрим общие свойства каналов генерации излучения, такие как положение и ширина спектральной области излучения $[\Omega_{\min}; \Omega_{\max}]$ для заданного канала. Эти свойства зависят от характеристик атомной мишени (энергии начального связанного состояния) и параметров лазерного поля, с которым данная атомная система взаимодействует. Представляет интерес вклад различных каналов генерации и их спектральное перекрытие.

Интервал частот $[\Omega_{\min}; \Omega_{\max}]$ может быть определен из требования существования вещественных решений переверальных уравнений для классических времен ионизации и рекомбинации. Для их нахождения мы параметризуем электрическое поле ИК-импульса через векторный потенциал $\mathbf{A}_{IR}(t)$:

$$\mathbf{F}_{IR}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}_{IR}(t)}{\partial t}, \quad (63a)$$

$$\mathbf{A}_{IR}(t) = -\mathbf{e}_x \frac{F_{IR}}{\omega_{IR}} f_{IR}(t) \sin(\omega_{IR}t), \quad (63b)$$

$$f_{IR}(t) = \begin{cases} \cos^2\left(\frac{\pi t}{T_{IR}}\right) & |t| \leq \frac{T_{IR}}{2} \\ 0 & |t| \geq \frac{T_{IR}}{2} \end{cases} \quad (63c)$$

где $T_{IR} = 5T_{IR}$ — длительность импульса, $T_{IR} = 2\pi/\omega_{IR}$. Во всех численных расчетах мы полагаем $E_0 = -13.6$ эВ, что соответствует основному состоянию атома водорода.

4.2.1. ВУФ-рекомбинационный канал

Для ВУФ-рекомбинационного канала генерации времена ионизации t'_s и рекомбинации t_s удовлетворяют системе уравнений (7) и (62):

$$\mathbf{K}'_s \cdot \dot{\mathbf{K}}'_s = 0, \quad \mathbf{K}^2(t'_s, t_s) = 2(\Omega + E_0 - n\omega_{XUV}). \quad (64)$$

Как видно из (64), решение данной системы для произвольного n может быть получено из решения для $n = 0$ посредством соответствующего сдвига частоты генерируемого излучения: $\Omega \rightarrow \Omega + n\omega_{XUV}$. Поэтому ниже мы анализируем случай $n = 0$, который, очевидно, соответствует генерации гармоник в отсутствие ВУФ-поля. Система (64) имеет действительные решения для $\Omega > |E_0|$ и $\Omega < \max \mathbf{K}^2/2 + |E_0| = \alpha_0 u_p + |E_0|$, где $u_p = F_{IR}^2/(4\omega_{IR}^2)$, α_0 — числовой фактор, зависящий от формы огибающей ИК-импульса, например, для длинного монохроматического импульса ($f_{IR}(t) \equiv 1$) $\alpha_0 \approx 3.17$.

На рис. 1 представлена зависимость частоты Ω генерируемого излучения от времен рекомбинации t_j . Цветом изображено абсолютное значение туннельного множителя $a_j^{(tun)}$, входящего в выражение (14b) для парциальной амплитуды генерации высших гармоник ИК-поля. Из рисунка видно, что для фиксированных параметров лазерного импульса число решений системы (64) растет с уменьшением Ω , что приводит к формированию сложной интерференционной структуры в области плато [17]. В окрестности глобального максимума для Ω (т. е. отсечки ИК-индуцированного плато в спектрах ГВГ) существует только два решения, определяющие известные интерференционные осцилляции выхода ГВГ в области отсечки плато [74, 75].

4.2.2. ВУФ-ионизационный канал

Для ВУФ-ионизационного канала (состоящего из ν -фотонном переходе электрона из основного состояния в континуум, его распространении под действием ИК-поля и последующей рекомбинации) времена ионизации и рекомбинации определяются системой уравнений

$$\frac{\tilde{\mathbf{K}}'^2}{2} = E_0 + \nu\omega_{XUV}, \quad (65a)$$

$$\frac{\tilde{\mathbf{K}}^2}{2} = E_0 + \Omega, \quad (65b)$$

где $\tilde{\mathbf{K}}' = \mathbf{K}'(\tilde{t}, \tilde{t}')$, $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K}(\tilde{t}, \tilde{t}')$.

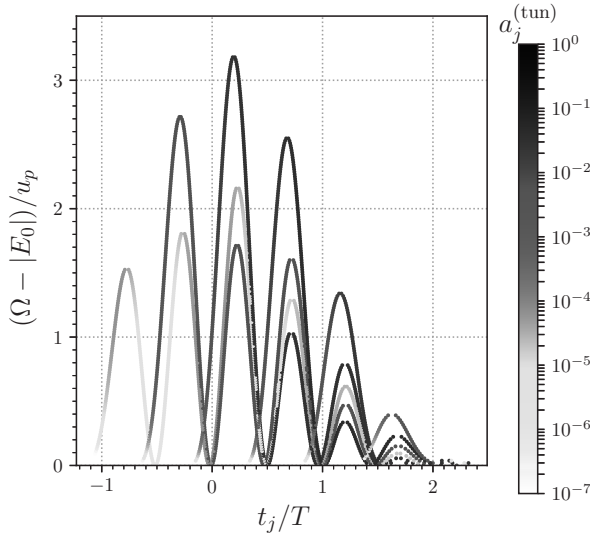


Рис. 1. Зависимость времени рекомбинации от частоты генерируемого излучения для ИК-импульса с несущей частотой $\omega = 1$ эВ и пиковой интенсивностью $2 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Цветом показана значение туннельного фактора (10), вычисленного для времен ионизации и рекомбинации, удовлетворяющих системе уравнений (64). $u_p = 26.89$ эВ, $|E_0| = 13.65$ эВ

Уравнение (65а) имеет вещественные решения при выполнении следующего необходимого условия:

$$\nu\omega_{XUV} \leq \max \left(|E_0| + \frac{\tilde{\mathbf{K}}'^2}{2} \right) = |E_0| + \alpha_0 u_p. \quad (66)$$

Для определения границ спектральной области $[\Omega_{\min}; \Omega_{\max}]$ классически разрешенных частот генерируемого излучения заметим, что система уравнений (65) инвариантна по отношению к замене величин $(\tilde{\mathbf{K}}', E_\nu) \leftrightarrow (\tilde{\mathbf{K}}, \tilde{\Omega})$, где $\tilde{\Omega} = \Omega + E_0$, и значения максимумов $\tilde{\mathbf{K}}'^2/2$ и $\tilde{\mathbf{K}}^2/2$ одинаковые в силу очевидной симметрии в зависимости $\mathbf{K}(t, t')$ и $\mathbf{K}'(t, t')$ от времен t, t' (см. соотношения (6) и (8)). Следовательно, в плоскости переменных $\tilde{\Omega}$ и E_ν искомая область вещественных решений (или классически разрешенных энергий $\tilde{\Omega}$ и E_ν) симметрична относительно прямой $\tilde{\Omega} = E_\nu$. Более того, так как импульсы \mathbf{K} и \mathbf{K}' пропорциональны F_{IR}/ω_{IR} , область вещественных решений в координатах $\tilde{\Omega}, E_\nu$ масштабируется на величину u_p . Из вышесказанного следует, что граница классически разрешенных энергий может быть задана с помощью некоторой симметричной функции $g(x, y) = g(y, x)$ двух аргументов $x = \tilde{\Omega}/u_p$ и $y = E_\nu/u_p$ в виде уравнения

$$g\left(\frac{\tilde{\Omega}}{u_p}, \frac{E_\nu}{u_p}\right) = 0.$$

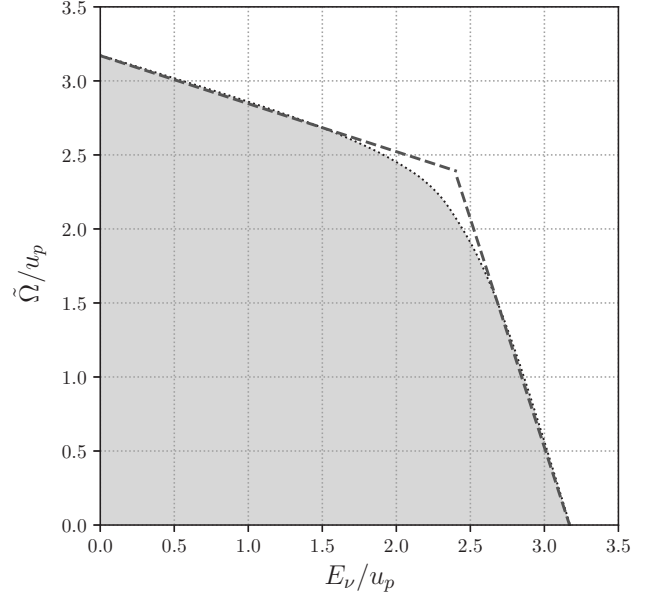


Рис. 2. Область существования решений системы перекрестных уравнений (65). Темно-серым цветом обозначена область параметров, полученная в результате численного решения, красная штриховая линия — линейный закон (67)

На рис. 2 показана область классически разрешенных энергий $\tilde{\Omega}$ и E_ν , полученных из численного анализа системы уравнений (65). Искомая область хорошо аппроксимируется двумя прямыми [76]:

$$g\left(\frac{\tilde{\Omega}}{u_p}, \frac{E_\nu}{u_p}\right) \approx \begin{cases} \frac{\tilde{\Omega}}{u_p} + \beta_0 \frac{E_\nu}{u_p} - \alpha_0, & \tilde{\Omega} > E_\nu, \\ \frac{E_\nu}{u_p} + \beta_0 \frac{\tilde{\Omega}}{u_p} - \alpha_0, & \tilde{\Omega} < E_\nu \end{cases} \quad (67)$$

где

$$\beta_0 = F_{IR}(t'_0)/F_{IR}(t_0),$$

t'_0 и t_0 — времена ионизации и рекомбинации, соответствующие глобальному максимуму $\tilde{\mathbf{K}}^2/2$ (для монохроматического поля $\beta_0 = 0.324$).

Зависимость решений системы уравнений (65) от частоты генерируемого излучения Ω представлена на рис. 3. Каждая пара решений (\tilde{t}', \tilde{t}) отображается точкой, цвет которой соответствует заданному значению ω_{XUV} . Как видно из представленного рисунка, а также согласно приведенной выше оценке (66), количество вещественных корней системы (65) уменьшается с ростом ω_{XUV} , при этом область возможных значений времен ионизации и рекомбинации сужается (см. области, ограниченные замкнутыми кривыми на рис. 3). Напомним, что в развиваемой теории взаимодействие ВУФ-импульса

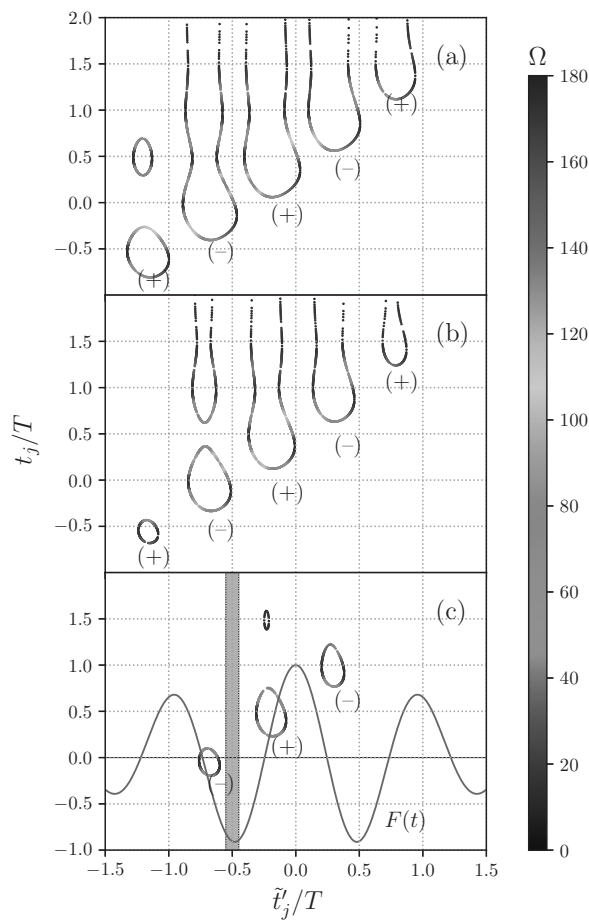


Рис. 3. Решения системы уравнений (65) для классических времен ионизации t'_+ и рекомбинации t_+ для случая однофотонной ионизации ($\nu = 1$) и различных значений энергии ВУФ-фотона: (а) $\omega_{XUV} = 40$ эВ, (б) $\omega_{XUV} = 60$ эВ, (с) $\omega_{XUV} = 100$ эВ. Закрашенная фиолетовая область определяет длительность ВУФ-импульса. Энергия начального состояния, несущая частота ИК-импульса, длительность ВУФ-импульса и временная задержка между импульсами такие же, как на рис. 1, пиковая интенсивность ИК-импульса $I = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Знаки (\pm) показывают направления мгновенного импульса $\tilde{\mathbf{K}}$ электрона в момент ионизации относительно вектора поляризации \mathbf{e}_x ИК-поля: $(+)$ для случая $(\tilde{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{e}_x) > 0$, $(-)$ для $(\tilde{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{e}_x) < 0$. Черная линия показывает профиль напряженности ИК-поля в произвольных единицах

с атомной системой определяется конкретными моментами ионизации и рекомбинации (см. раздел 3), задающих замкнутую траекторию свободного электрона в ИК-поле. Поэтому при определенных временах задержки рассматриваемый канал генерации излучения может быть подавлен из-за отсутствия перекрытия области решений системы (65) с времен-

ным интервалом взаимодействия с ВУФ-импульсом. Например, на рис. 3 с показано, что для ВУФ-импульса с временной задержкой $\tau = -0.5T$ область допустимых значений \tilde{t}' не пересекается с временным интервалом действия ВУФ-импульса.

Зависимости частоты генерируемого излучения от времен рекомбинации для всех обсуждаемых выше каналов представлены на рис. 4. Области, соответствующие упругому рассеянию ВУФ-фотона на атомной системе (рэлеевское рассеяния) и генерации второй гармоники, обозначены на рисунке горизонтальными пунктирными линиями (непрерывные жирные горизонтальные линии соответствуют $\Omega = \omega_{XUV}$ и $\Omega = 2\omega_{XUV}$). При интенсивностях ИК-импульса $I \gtrsim 2 \cdot 10^{14}$ Вт/см² мы наблюдаем спектральное перекрытие канала генерации гармоник в ИК-поле (черные жирные линии на рис. 4) с каналом упругого рассеяния ВУФ-фотона, которое приводит к возникновению характерных осцилляций в спектре генерации гармоник [60]. С ростом интенсивности ИК-импульса происходит перекрытие с каналами генерации гармоник ВУФ-излучения (см. рис. 4 с, где наблюдается перекрытие с каналом генерации второй ВУФ-гармоники при $I = 4 \cdot 10^{14}$ Вт/см²). Отметим, что для возникновения интерференции между различными каналами генерации излучения необходимым условием является как спектральное перекрытие каналов, так и соизмеримые вероятности генерации в искоемых каналах. ВУФ-ионизационные каналы (зеленая и оранжевая линии) спектрально перекрываются только с каналом генерации гармоник в одиночном ИК-импульсе. Более того, как видно из рис. 4, с ростом числа фотонов в ВУФ-ионизационном канале, область спектрального перекрытия уменьшается, что, очевидно, связано с меньшей величиной набранной энергии электроном при распространении в ИК-поле после поглощения ν ВУФ-фотонов (см. рис. 2). Таким образом, наблюдение ВУФ-ионизационных каналов генерации излучения с $\nu > 1$ весьма затруднено ввиду подавленности более интенсивным каналом генерации гармоник в отсутствие ВУФ-импульса и возможно только при существенном увеличении интенсивности ВУФ-поля. Для $\nu = 1$ ВУФ-ионизационный канал генерации излучения может быть выделен при ортогональной геометрии ИК- и ВУФ-импульсов [77]. Напротив, ВУФ-рекомбинационные каналы (серые тонкие линии на рис. 4) дают вклад в генерацию более высокочастотного излучения, образуя последовательные платообразные структуры в спектрах генерации высоких гармоник [53]. Как правило, ВУФ-

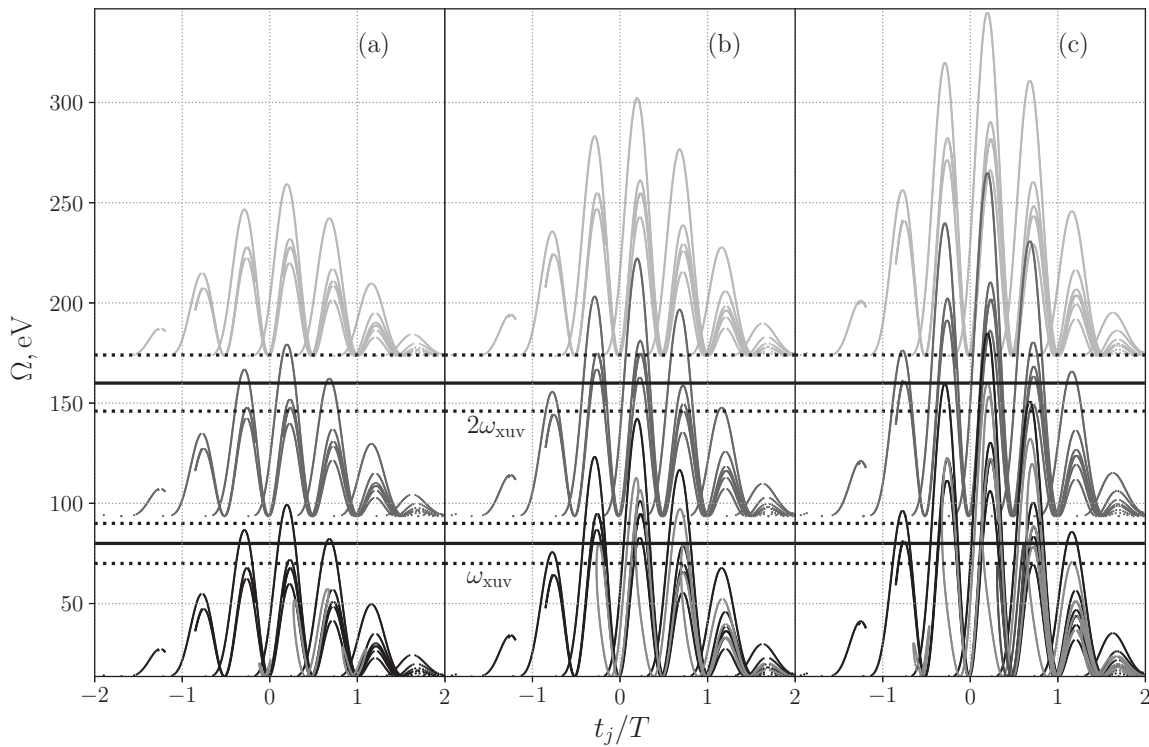


Рис. 4. Спектрограммы каналов генерации для различных пиковых интенсивностей ИК-импульса: $I = 2 \cdot 10^{14}$ Вт/см² (а), $3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² (б) и $4 \cdot 10^{14}$ Вт/см² (в). Черные линии показывают канал ГВГ в отсутствие ВУФ-поля, серые линии — ВУФ-рекомбинационный канал с поглощением одного и двух ВУФ-фотонов, зеленые (оранжевые) линии — ВУФ-ионизационный канал с поглощением одного (двух) ВУФ-фотонов. Сплошные горизонтальные линии показывают значения $\Omega = N\omega_{XUV}$ ($N = 1, 2$), пунктирные горизонтальные линии — границы спектральных областей для первой и второй ВУФ-гармоник. Энергия ВУФ-фотона $\omega_{XUV} = 80$ эВ, энергия начального состояния, несущая частота ИК-поля и параметры огибающей ВУФ-импульса такие же, как на рис. 1

рекомбинационные каналы интерферируют с каналами генерации гармоник ВУФ-излучения [39]. Отметим, что можно подобрать условия для спектрального перекрытия канала генерации гармоник в одиночном ИК-импульсе с ВУФ-рекомбинационным и ВУФ-ионизационным каналами [см. рис. 4 с].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе развит адиабатический подход для анализа эффектов взаимодействия атомной системы, модифицированной интенсивным ИК-полем, с коротким (аттосекундным) ВУФ-импульсом. Нелинейные по ВУФ-взаимодействию эффекты заключаются в возникновении дополнительных ВУФ-индуцированных каналов генерации излучения. По характеру влияния ВУФ-импульса на атом эти каналы можно разделить на три типа. К первому типу относится обусловленная ВУФ-импульсом

модификация нелинейных восприимчивостей атомной системы. Для исходно неполяризованных мишеней восприимчивости нечетных порядков (например, атомная поляризуемость, описывающая рэлеевское рассеяние ВУФ-фотона [60], или восприимчивость третьего порядка, определяющая генерацию третьей ВУФ-гармоники) не исчезают в отсутствие ИК-поля, а значит в полях умеренных интенсивностей могут быть аппроксимированы восприимчивостями свободного атома. Восприимчивости четных порядков (например, описывающие эффект ВУФ-выпрямления [61] или генерацию второй ВУФ-гармоники [39]) исчезают при выключении ИК-поля, будучи обусловленными ИК-индуцированным нарушением симметрии атомного состояния. Первый тип каналов подробно рассмотрен в работах по указанным выше ссылкам.

Основное внимание данного исследования уделено второму и третьему типу каналов — это соответственно ВУФ-индуцированные каналы ионизации,

закрывающиеся в поглощении ВУФ-фотонов на первом этапе трехшагового механизма перераспределения, и ВУФ-рекомбинации с поглощением ВУФ-фотонов в момент возврата электрона к атомному остову. Анализ вклада парциальных амплитуд, связанных с различными замкнутыми классическими траекториями электрона в ИК-поле в соответствии с перечисленными каналами ВУФ-ионизации и ВУФ-рекомбинации, показал, что для умеренных интенсивностей ИК-импульса спектральная область ВУФ-ионизационных каналов перекрывается только с областью спектра гармоник ИК-поля в отсутствие ВУФ-импульса, тогда как вероятность интерференции с каналами генерации ВУФ-гармоник пренебрежимо мала. Напротив, поглощение ВУФ-фотонов на этапе рекомбинации (канал ВУФ-рекомбинации) существенно расширяет спектр генерируемого излучения, в результате чего возможна интерференция различных каналов генерации. Отметим, что для случая короткого ВУФ-импульса энергетическая область каналов генерации существенно зависит от времени задержки между ВУФ-и ИК-импульсами. Например, в случае высоких энергий ВУФ-фотона существуют интервалы времен задержки, для которых канал ВУФ-ионизационной генерации подавляется.

Стоит подчеркнуть, что интерференционные явления, обусловленные спектральным перекрытием различных ВУФ-индуцированных каналов генерации излучения с каналом ГВГ ИК-поля, являются ключом к лучшему пониманию атомных фото-процессов, протекающих в поле синхронизованных ВУФ-и ИК-импульсов, а также могут служить основой для оптических методов извлечения временного профиля ИК-импульса из измеряемых спектров генерации [39, 77, 78].

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержки Российского научного фонда (теории генерации излучения атомом в ИК- и ВУФ-импульсах, проект № 22-12-00223), гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (общая теория возмущений по ВУФ-взаимодействию для ИК-модифицированного атома, проект № 075-15-2021-1351).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Caillat, J. Zanghellini, M. Kitzler, O. Koch, W. Kreuzer, and A. Scrinzi, *Phys. Rev. A* **71**, 012712 (2005).
2. D. Bauer and P. Koval, *Comp. Phys. Comm.* **174**, 396 (2006).
3. D. A. Telnov and S.-I. Chu, *Phys. Rev. A* **80**, 043412 (2009).
4. L. Greenman, P. J. Ho, S. Pabst, E. Kamarchik, D. Mazziotti, and R. Santra, *Phys. Rev. A* **82**, 023406 (2010).
5. D. A. Telnov, K. E. Sosnova, E. Rozenbaum, and S.-I. Chu, *Phys. Rev. A* **87**, 053406 (2013).
6. T. Sato and K. L. Ishikawa, *Phys. Rev. A*, **88**, 023402 (2013).
7. S. Patchkovskii and H. Muller, *Comp. Phys. Comm.* **199**, 153 (2016).
8. V. Tulsy and D. Bauer, *Comp. Phys. Comm.* **251**, 107098 (2020).
9. A. A. Romanov, A. A. Silaev, M. V. Frolov, and N. V. Vvedenskii, *Phys. Rev. A* **101**, 013435 (2020).
10. V. V. Strelkov, *Phys. Rev. A* **74**, 013405 (2006).
11. O. I. Tolstikhin, T. Morishita, and S. Watanabe, *Phys. Rev. A* **81**, 033415 (2010).
12. O. I. Tolstikhin and T. Morishita, *Phys. Rev. A* **86**, 043417 (2012).
13. Y. Okajima, O. I. Tolstikhin, and T. Morishita, *Phys. Rev. A* **85**, 063406 (2012).
14. M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. A. Minina, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, M. Y. Ivanov, and A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **99**, 053403 (2019).
15. A. V. Flegel, N. L. Manakov, A. V. Sviridov, M. V. Frolov, L. Geng, and L.-Y. Peng, *Phys. Rev. A* **102**, 063119 (2020).
16. A. V. Sviridov, M. V. Frolov, S. V. Popruzhenko, L. Geng, and L.-Y. Peng, *Phys. Rev. A* **106**, 033117 (2022).
17. A. V. Flegel, N. L. Manakov, I. V. Breev, and M. V. Frolov, *Phys. Rev. A* **104**, 033109 (2021).
18. A. A. Romanov, A. A. Silaev, T. S. Sarantseva, M. V. Frolov, and N. V. Vvedenskii, *New J. Phys.* **23**, 043014 (2021).
19. D. B. Milošević and F. Ehlotzky, *Adv. At., Mol., Opt. Phys.*, **49**, 373 (2003).

20. W. Becker, F. Grasbon, R. Kopold, D. B. Milošević, G. G. Paulus, and H. Walther, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **48**, 35 (2002).
21. A. Galstyan, O. Chuluunbaatar, A. Hamido, Y. V. Popov, F. Mota-Furtado, P. F. O'Mahony, N. Janssens, F. Catoire, and B. Piraux, *Phys. Rev. A* **93**, 023422 (2016).
22. Y. Popov, A. Galstyan, F. Mota-Furtado, P. F. O'Mahony, and B. Piraux, *Eur. Phys. J. D* **71**, 93 (2017).
23. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964) [L. V. Keldysh, *JETP* **20**, 1307 (1965)].
24. М. В. Федорюк, *Метод перевала*, Наука, Москва (1977).
25. P. Salières, B. Carré, L. Le Déroff, F. Grasbon, G. G. Paulus, H. Walther, R. Kopold, W. Becker, D. B. Milošević, A. Sanpera, and M. Lewenstein, *Science* **292**, 902 (2001).
26. D. B. Milošević, *Phys. Rev. A* **96**, 023413 (2017).
27. P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).
28. W. Becker, A. Lohr, and M. Kleber, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, L325 (1994).
29. M. V. Frolov, N. L. Manakov, T. S. Sarantseva, M. Y. Emelin, M. Y. Ryabikin, and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 243901 (2009).
30. M. V. Frolov, N. L. Manakov, and A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **82**, 023424 (2010).
31. A. D. Shiner, B. E. Schmidt, C. Trallero-Herrero, H. J. Wörner, S. Patchkovskii, P. B. Corkum, J.-C. Kieffer, F. Légaré, and D. M. Villeneuve, *Nat. Phys.* **7**, 464 (2011).
32. A. D. Shiner, B. E. Schmidt, C. Trallero-Herrero, P. B. Corkum, J.-C. Kieffer, F. Légaré, and D. M. Villeneuve, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 74010 (2012).
33. V. N. Ostrovsky and D. A. Telnov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 2397 (1987).
34. V. N. Ostrovsky and D. A. Telnov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 2421 (1987).
35. M. Pont, R. Shakeshaft, and R. M. Potvliege, *Phys. Rev. A* **42**, 6969 (1990).
36. D. A. Telnov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 2967 (1991).
37. M. Pont, R. M. Potvliege, R. Shakeshaft, and Z. Teng, *Phys. Rev. A* **45**, 8235 (1992).
38. A. V. Flegel and M. V. Frolov, *J. Phys. A: Math. Theor.* **56**, 505304 (2023).
39. A. A. Romanov, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, I. V. Breev, A. V. Flegel, and M. V. Frolov, *Phys. Rev. A* **106**, 063101 (2022).
40. K. Ishikawa, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 043002 (2003).
41. K. L. Ishikawa, *Phys. Rev. A* **70**, 013412 (2004).
42. K. Schiessl, E. Persson, A. Scrinzi, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. A* **74**, 053412 (2006).
43. S. V. Popruzhenko, D. F. Zaretsky, and W. Becker, *Phys. Rev. A* **81**, 063417 (2010).
44. K. J. Schafer, M. B. Gaarde, A. Heinrich, J. Biegert, and U. Keller, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 023003 (2004).
45. M. B. Gaarde, K. J. Schafer, A. Heinrich, J. Biegert, and U. Keller, *Phys. Rev. A* **72**, 013411 (2005).
46. J. Biegert, A. Heinrich, C. P. Hauri, W. Kornelis, P. Schlup, M. P. Anscombe, M. B. Gaarde, K. J. Schafer, and U. Keller, *J. Mod. Opt.* **53**, 87 (2006).
47. C. Figueira de Morisson Faria, P. Salières, P. Villain, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. A* **74**, 053416 (2006).
48. G.-T. Zhang, J. Wu, C.-L. Xia, and X.-S. Liu, *Phys. Rev. A* **80**, 055404 (2009).
49. M. R. Miller, C. Hernández-García, A. Jaroń-Becker, and A. Becker, *Phys. Rev. A* **90**, 053409 (2014).
50. P. B. Corkum, N. H. Burnett, and M. Y. Ivanov, *Opt. Lett.* **19**, 1870 (1994).
51. A. Fleischer and N. Moiseyev, *Phys. Rev. A* **77**, 010102 (2008).
52. A. Fleischer, *Phys. Rev. A* **78**, 053413 (2008).
53. T. S. Sarantseva, M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, and A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **98**, 063433 (2018).

54. C. Buth, F. He, J. Ullrich, C. H. Keitel, and K. Z. Hatsagortsyan, *Phys. Rev. A* **88**, 033848 (2013).
55. A. C. Brown and H. W. van der Hart, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 093201 (2016).
56. J.-A. You, J. M. Dahlström, and N. Rohringer, *Phys. Rev. A* **95**, 023409 (2017).
57. J. Leeuwenburgh, B. Cooper, V. Averbukh, J. P. Marangos, and M. Ivanov, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 123002 (2013).
58. J. Leeuwenburgh, B. Cooper, V. Averbukh, J. P. Marangos, and M. Ivanov, *Phys. Rev. A* **90**, 033426 (2014).
59. C. Buth, M. C. Kohler, J. Ullrich, and C. H. Keitel, *Opt. Lett.* **36**, 3530 (2011).
60. A. A. Romanov, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, A. V. Flegel, and M. V. Frolov, *Opt. Lett.* **47**, 3147 (2022).
61. A. V. Flegel and M. V. Frolov, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 243202 (2023).
62. А. А. Минина, М. В. Фролов, А. Н. Желтухин, Н. В. Введенский, *Квантовая электроника* **47**, 216 (2017) [A. A. Minina, M. V. Frolov, A. N. Zheltukhin, and N. V. Vvedenskii, *Quant. Elect.* **47**, 216 (2017)].
63. M. Y. Kuchiev and V. N. Ostrovsky, *Phys. Rev. A* **60**, 3111 (1999).
64. M. V. Frolov, A. V. Flegel, N. L. Manakov, and A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **75**, 063407 (2007).
65. R. M. Potvliege and R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **40**, 3061 (1989).
66. N. L. Manakov, M. V. Frolov, A. F. Starace, and I. I. Fabrikant, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, R141 (2000).
67. Н. Л. Манаков, А. Г. Файнштейн, *ТМФ* **48**, 385 (1981) [N. L. Manakov and A. G. Fainshtein, *Theoret. and Math. Phys.* **48**, 815 (1981)].
68. E. A. Pronin, A. F. Starace, M. V. Frolov, and N. L. Manakov, *Phys. Rev. A* **80**, 063403 (2009).
69. P. W. Langhoff, S. T. Epstein, and M. Karplus, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 602 (1972).
70. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, *Phys. Rep.* **141**, 320 (1986).
71. G. Gademann, F. Kelkensberg, W. K. Siu, P. Johnsson, M. B. Gaarde, K. J. Schafer, and M. J. J. Vrakking, *New J. Phys.* **13**, 033002 (2011).
72. D. Azoury, M. KrGjger, G. Orenstein, H. R. Larsson, S. Bauch, B. D. Bruner, and N. Dudovich, *Nat. Comm.* **8**, 1453 (2017).
73. M. Krüger, D. Azoury, B. D. Bruner, and N. Dudovich, *Appl. Sci.* **9**, 378 (2019).
74. M. V. Frolov, N. L. Manakov, T. S. Sarantseva, and A. F. Starace, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 035601 (2009).
75. M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. M. Popov, O. V. Tikhonova, E. A. Volkova, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, and A. F. Starace, *Phys. Rev. A* **85**, 033416 (2012).
76. А. В. Флегель, М. В. Фролов, А. Н. Желтухин, Н. В. Введенский, *Квантовая электроника* **47**, 222 (2017) [A. V. Flegel, M. V. Frolov, A. N. Zheltukhin, and N. V. Vvedenskii, *Quant. Electron.* **47**, 222 (2017)].
77. T. S. Sarantseva, A. A. Romanov, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, and M. V. Frolov, *Phys. Rev. A* **107**, 023113 (2023).
78. A. A. Romanov, A. A. Silaev, T. S. Sarantseva, A. V. Flegel, N. V. Vvedenskii, and M. V. Frolov, *Opt. Lett.* **48**, 3583 (2023).

ОТСКОК В НЕМИНИМАЛЬНОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ МОДЕЛИ СКАЛЯРНО-ТЕНЗОРНОЙ ГРАВИТАЦИИ

С. О. Алексеев ^{a,b*}, А. В. Немтинова ^{c**}, О. И. Зенин ^{b***}, А. А. Байдерин ^b

^a Государственный астрономический институт им. П. К. Штернберга,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119234, Москва, Россия

^b Кафедра квантовой теории и физики высоких энергий, физический факультет,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119234, Москва, Россия

^c Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина
620002, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 22 августа 2023 г.,
после переработки 13 сентября 2024 г.
Принята к публикации 14 сентября 2024 г.

Установлены необходимые условия реализации «отскока» масштабного фактора в начальный момент Вселенной для более широкого диапазона значений параметров. Этот факт представляется существенным как при дальнейшем построении теории квантовой гравитации, так и для рассмотрения последующей космологической эволюции на основании данной модели.

DOI: 10.31857/S0044451025010031

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время общая теория относительности (ОТО) с высокой точностью объясняет почти весь массив астрономических данных. При этом, уже начиная с самых первых космологических решений [1], уравнения Эйнштейна должны в обязательном порядке содержать правую часть — тензор энергии-импульса. Один из подходов состоит в том, что весь массив современных астрофизических данных хорошо описывается уравнениями ОТО, и именно для объяснения физической природы правой части и её источника создаются теории гравитации, расширяющие ОТО различными способами [2–6].

Одним из перспективных направлений расширения ОТО явились скалярно-тензорные теории гравитации, в которых, как следует из названия, в дополнение к геометрическим членам и инвариантам кривизны в рассмотрение включены физические по-

ля. Для решения проблемы увеличения порядка дифференциальных уравнений поля сконструированы теории, в которых высшие степени взаимно сокращаются, и наиболее общим примером такого подхода стала модель Хорндески [7, 8]. Несмотря на значительное ограничение модели Хорндески из данных гравитационно-волновой астрономии [9, 10], интерес к ней (и теориям, созданным на ее основе и проходящим тест GW170817) не ослабевает. На ее основе также создаются модели несингулярной космологии, в которых в начальный момент времени отсутствует сингулярность, заменяемая на «отскок» масштабного фактора [11, 12]. Подход представляется перспективным, и в рамках теории Хорндески рассматривались модели, названные «Fab Four», в которых сами поправки, без дополнительных подгоночных параметров типа Λ -члена, обеспечивают ускоренное расширение Вселенной [13, 14]. Несингулярные космологические решения в рамках Fab Four, как примера скалярно-тензорной теории менее сложной структуры, чем теория Хорндески в общем виде, также обсуждались ранее [15].

Идея добавления квантово-полевых поправок в модели гравитации [16] позволяет, например, ограничить размер нелокальностей в теориях гравита-

* E-mail: salexeyev@gmail.com

** E-mail: nemtinova14@mail.ru

*** E-mail: dkiiabu4@gmail.com

ции в квантовом пределе [17]. Этот же подход был применен к модели Fab Four [18], и дополнительный учет квантово-полевых поправок приводит в том числе и к тому, что скорость распространения гравитационных волн теперь соответствует экспериментальному результату гравитационно-волновой астрономии. Все это говорит о перспективности рассмотрения скалярно-тензорных моделей. Поэтому нами рассмотрена неминимальная эффективная модель скалярно-тензорной гравитации с полевыми членами третьего и четвертого порядков, образованная суммированием однопетлевых взаимодействий [19] в виде

$$S = \int \sqrt{-g} \left[\left(\frac{2}{\kappa^2} + \alpha \phi^2 \right) R + \kappa^2 \beta G^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - \frac{1}{3!} \lambda \phi^3 - \frac{1}{4!} g \phi^4 \right] d^4 x, \quad (1)$$

где $\kappa^2 = 32\pi G$, G — постоянная Ньютона, ϕ — новое скалярное поле, R — скалярная кривизна, α и β — безразмерные постоянные, λ — кубическая скалярная связь с размерностью массы, g — безразмерная скалярная связь четвертого порядка, $G_{\mu\nu}$ — тензор Эйнштейна ($G_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R$). Несмотря на «расширенность», эта модель все еще гораздо проще, чем стандартная версия теории Хорндески или DHOST, что повышает интерес к ней и ее возможности объяснения темной энергии и процессов в ранней Вселенной. Для дальнейшего анализа применимости обсуждаемой модели к моделированию эволюции ранней Вселенной необходимо изучить ее предсказания для реализации отскока и генезиса [20], и настоящая статья посвящена первому шагу в этом направлении — исследованию условий существования отскока. Здесь необходимо отметить, что отсутствие начальной сингулярности в космологической модели значительно повышает интерес к ней. В качестве примера напомним о поиске пространств параметров, при которых реализуется «отскок» [21] в гравитации с поправками второго порядка по кривизне — модели с членом Гаусса – Бонне [22, 23] — одного из кандидатов на роль квазиклассического предела струнной гравитации [24]. Более того, отскок проявляется уже на уровне простого добавления скалярного поля — модели Бранса – Дикке [25]. Таким образом, наличие в космологическом решении рассматриваемой теории несингулярной асимптотики является дополнительным аргументом в пользу перспективности рассматриваемой теории, и, в качестве первого шага изучения сильных и слабых сторон теории (1), мы и исследуем этот вопрос. По-

скольку ранее были предложены дополнительные ограничения на параметры теории для прохождения астрономических тестов (мы приводим их в конце разд. 3) [19], представляется интересным сравнить эти ограничения на пространство параметров, налагаемые требованием наличия «отскока».

Статья построена следующим образом. Раздел 2 посвящен получению уравнений поля в теории, предложенной в [19], в разд. 3 исследованы ограничения на пространство параметров, налагаемые требованием наличия «отскока», разд. 4 содержит обсуждение полученных результатов и выводы.

2. УРАВНЕНИЯ ПОЛЯ

Уравнения Клейна – Гордона получаются варьированием действия (1) по скалярному полю. Следуя [26], имеем

$$-\frac{1}{2!} \lambda \phi^2 - \frac{1}{3!} g \phi^3 + \square \phi + 2\alpha \phi R - 2\kappa^2 \beta G^{\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu \phi = 0. \quad (2)$$

Варьируем по метрическому тензору и вводим эффективную гравитационную постоянную $G_{eff}(\phi)$, зависящую только от скалярного поля, так что

$$\frac{2}{\kappa^2} + \alpha \phi^2 = \frac{1}{16\pi G_{eff}(\phi)}. \quad (3)$$

В результате уравнение Эйнштейна примет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mu\nu} = & \frac{1}{16\pi G_{eff}} G_{\mu\nu} - (\nabla_{\mu\nu} - g_{\mu\nu} \square) \alpha \phi^2 - \frac{1}{2} \nabla_\mu \phi \nabla_\nu \phi - \\ & - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{3!} \lambda \phi^3 + \frac{1}{4!} g \phi^4 \right) - \\ & - \kappa^2 \beta \left(-\nabla_\lambda \nabla_\mu \phi \nabla^\lambda \nabla_\nu \phi + \nabla_\mu \nabla_\nu \phi \square \phi - \right. \\ & - R_{\alpha\mu\nu\beta} \nabla^\alpha \phi \nabla^\beta \phi - \frac{1}{2} \left[\nabla_\mu \phi G_{\nu\lambda} \nabla^\lambda \phi + \right. \\ & + \nabla_\nu \phi G_{\mu\lambda} \nabla^\lambda \phi \left. \right] - \frac{1}{2} \left[\nabla_\mu \phi R_{\nu\lambda} \nabla^\lambda \phi + \right. \\ & + \nabla_\nu \phi R_{\mu\lambda} \nabla^\lambda \phi \left. \right] + g_{\mu\nu} \left[R^{\alpha\beta} \nabla_\alpha \phi \nabla_\beta \phi - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} (\square \phi)^2 + \frac{1}{2} (\nabla_{\alpha\beta} \phi)^2 \right] \Big) = \frac{1}{2} T_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $T_{\mu\nu}$ — тензор энергии-импульса материи:

$$T_{\mu\nu} = \frac{-2}{\sqrt{-g}} \frac{\delta(\sqrt{-g} L_m)}{\delta g^{\mu\nu}}, \quad (5)$$

L_m — лагранжиан материи.

3. КОСМОЛОГИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ С «ОТСКОКОМ»

Аналогично [22, 23] рассмотрим изотропное (фридмановское) космологическое решение вида

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2), \quad (6)$$

где и масштабный фактор a , и скалярное поле ϕ из действия (1) зависят только от временной координаты t .

Для исследования поведения в точке отскока рассмотрим систему (2)–(4). В точке отскока масштабный фактор должен быть положительным и конечным, т.е. $a = \text{const} > 0$. При этом для обеспечения минимума масштабного фактора именно в точке отскока и для того, чтобы избежать космологической сингулярности $a = 0$ в любой другой точке, необходимо, чтобы $\dot{a} = 0$ и $\ddot{a} > 0$. С учетом этого уравнения Эйнштейна в точке отскока можно переписать как

$$\frac{3}{4}\dot{\phi}^2 = -\frac{1}{12}\lambda\phi^3 - \frac{1}{48}g\phi^4, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} -2\frac{\ddot{a}}{a}\left(\frac{2}{\kappa^2} + \alpha\phi^2\right) - 2\alpha\phi\ddot{\phi} + \frac{1}{4}\dot{\phi}^2 - \\ - 5\kappa^2\beta\frac{\ddot{a}}{a}\dot{\phi}^2 + \frac{1}{12}\lambda\phi^3 + \frac{1}{48}g\phi^4 = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

а уравнение Клейна – Гордона – Фока (2) примет вид

$$\ddot{a} = \frac{a}{12\alpha\phi}\left(\ddot{\phi} - \frac{1}{2}\lambda\phi^2 - \frac{1}{6}g\phi^3\right). \quad (9)$$

Если рассматривать случай, в котором роль тензора энергии-импульса играет скалярное поле, его отсутствие будет означать отсутствие нетривиального космологического решения: $\phi = 0 \Rightarrow a = 0$. Так как последнее и есть избегаемая нами космологическая сингулярность, для гарантии ее отсутствия вводим дополнительное условие $\dot{\phi} = 0$, а также $\phi = \text{const} > 0$ и $\ddot{\phi} > 0$. Тогда из уравнения (7) получаем уравнение для скалярного поля:

$$\phi = -4\frac{\lambda}{g}.$$

Из уравнений (8) и (19) получаем выражение для второй производной скалярного поля:

$$\ddot{\phi} = -\frac{\lambda}{36\alpha}\left(\frac{\frac{1}{\alpha\kappa^2} + 8\frac{\lambda^2}{g^2}}{1 + \frac{1}{12\alpha} + \frac{g^2}{96\kappa^2\alpha^2\lambda^2}}\right).$$

Итоговая система неравенств (с учетом подстановки в (19) уравнений (7) и (8)) имеет вид

$$\phi = -4\frac{\lambda}{g} > 0, \quad (10)$$

$$\ddot{\phi} = -\frac{\lambda}{36\alpha}\left(\frac{\frac{1}{\alpha\kappa^2} + 8\frac{\lambda^2}{g^2}}{1 + \frac{1}{12\alpha} + \frac{g^2}{96\kappa^2\alpha^2\lambda^2}}\right) > 0, \quad (11)$$

$$a > 0, \quad (12)$$

$$\ddot{a} = \frac{ag}{1728\alpha^2}\left(\frac{\frac{1}{\alpha\kappa^2} + 8\frac{\lambda^2}{g^2}}{1 + \frac{1}{12\alpha} + \frac{g^2}{96\kappa^2\alpha^2\lambda^2}}\right) + \frac{a\lambda^2}{18\alpha g} > 0. \quad (13)$$

Из (10) получаем, что λ и g должны быть разных знаков. Также следует сказать, что необходимое условие стабильности модели это $g > 0$ (иначе потенциал скалярного поля будет не ограничен снизу и модель будет нестабильна). Из следующего неравенства (11) видно, что если $\lambda < 0$, то $\alpha > 0$. Остается последнее неравенство (13), которое автоматически выполняется из условий (10)–(12). Также можно рассмотреть случай $\alpha < 0$. Из (13) получаем

$$\left(\frac{\frac{1}{\alpha\kappa^2} + 8\frac{\lambda^2}{g^2}}{1 + \frac{1}{12\alpha} + \frac{g^2}{96\kappa^2\alpha^2\lambda^2}}\right) > -\frac{1728\alpha\lambda^2}{18g^2} > 0.$$

Из этого следует, что выражение в скобках будет больше нуля. В итоге условие (11) также выполняется в случае, если $\lambda > 0$ и $g < 0$. Однако это условие противоречит необходимому условию стабильности модели. Поэтому эти условия не подходят для данной задачи.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В неминимальной эффективной модели скалярно-тензорной гравитации с полевыми членами третьего и четвертого порядков, образованной суммированием однопетлевых взаимодействий [19], реализация решения типа «отскок» возможна. Необходимые условия реализации решения типа «отскок» следующие: параметры $\lambda < 0$, $g > 0$ и $\alpha > 0$. Ранее похожая модель исследовалась в [27], где $\alpha = 0$, отсутствует скалярное поле ϕ , но присутствует космологическая постоянная Λ , обеспечивая тот же эффект. Решение типа «отскок» реализуется в случае $\Lambda = 0$ (однако у нас невозможен случай $\lambda = g = 0$), $\rho = 0$ (в нашем случае аналогично объемная плотность равна нулю), $a_0 > 0$ (в нашем случае масштабный фактор $a > 0$) и $\beta < 0$ (это не противоречит нашим условиям). Следовательно, наши результаты частично совпадают с полученными ранее для более простой версии обсуждаемой модели, за исключением равенства нулю космологической постоянной и параметра α (в более простой версии теории он изначально равен нулю).

Таким образом, в обсуждаемой модели скалярно-тензорной гравитации, вместо начальной сингулярности, возможен «отскок» даже в самой простой конфигурации, причем при соблюдении изначальных ограничений на нее. Значит, эта модель, имея более простую структуру, чем большинство скалярно-тензорных моделей на основе теории Хорндески, решая проблему начальной сингулярности, с одной стороны, помогает приблизиться к построению квантовой теории гравитации, а с другой, имеет шанс на реализацию отскока и генезиса.

Финансирование. Работа О.И.З. финансировалась за счет средств Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», грант 22-2-2-11-1.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Friedmann, *Über die Krümmung des Raumes (О кривизне пространства)*, Z. Phys. **10**, 377 (1922).
2. С. О. Алексеев, Е. А. Памятных, А. В. Урсулов и др., *Общая теория относительности: Введение. Современное развитие и приложения*, URSS Москва (2022).
3. S. Capozziello and M. De Laurentis, Phys. Rep. **509**, 167 (2011).
4. E. Berti, E. Barausse, V. Cardoso, L. Gualtieri, and P. Pani, Class. Quant. Grav. **32**, 243001 (2015).
5. L. Barack et al., Class. Quant. Grav. **36**, 143001 (2019).
6. S. Alexeyev and V. Prokopov, Universe **8**, 283 (2022).
7. G. Horndeski, Int. J. Theor. Phys. **10**, 363 (1974).
8. T. Kobayashi, Rept. Prog. Phys. **82**, 086901 (2019).
9. J. Ezquiaga and M. Zumalacarregui, Phys. Rev. Lett. **119**, 251304 (2017).
10. P. Creminelli and F. Vernizzi, Phys. Rev. Lett. **119**, 251302 (2017).
11. A. A. Starobinsky, Phys. Lett. B **91**, 99 (1980); Adv. Ser. Astrophys. Cosmol. **3**, 130 (1987).
12. Y. Ageeva, P. Petrov, and V. Rubakov, Phys. Rev. D **104**, 063530 (2021).
13. C. Charmousis, E. J. Copeland, A. Padilla, and P. M. Saffin, Phys. Rev. Lett. **108**, 051101 (2012).
14. E. J. Copeland, A. Padilla, and P. M. Saffin, JCAP **12**, 026 (2012).
15. I. Torres, J. C. Fabris, and O. F. Piattella, Phys. Lett. B **798**, 135003 (2019).
16. X. Calmet, D. Croon, and C. Fritz, Eur. Phys. J. C **75**, 605 (2015).
17. S. Alexeyev, X. Calmet, and B. Latosh, Phys. Lett. B **776**, 111 (2018).
18. B. Latosh, Eur. Phys. J. C **78**, 991 (2018).
19. B. Latosh, Eur. Phys. J. C **80**, 845 (2020).
20. S. Mironov, V. Rubakov, and V. Volkova, Phys. Rev. D **100**, 083521 (2019).
21. S. Alexeyev, A. Toporensky, and V. Ustiansky, Class. Quant. Grav. **17**, 2243 (2000).
22. С. О. Алексеев, К. А. Ранну, ЖЭТФ **141**, 463 (2012).
23. S. Alexeyev and M. Senduk, Universe **6**, 25 (2020).
24. P. K. Townsend and P. van Nieuwenhuizen, Phys. Rev. D **19**, 3592 (1979).
25. И. Д. Новиков, А. А. Шацкий, С. О. Алексеев, Д. А. Третьякова, УФН **184**, 379 (2014).
26. T. Kobayashi, M. Yamaguchi, and J. Yokoyama, Prog. Theor. Phys. **126**, 511 (2011).
27. S. Sushkov and R. Galeev, Phys. Rev. D **108**, 044028 (2023).

SPINOR FIELD IN FLRW COSMOLOGY: SPHERICALLY SYMMETRIC CASE

B. Saha ^{a,b*}

^a *Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research
141980, Dubna, Moscow region, Russia*

^b *Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)
117198, Moscow, Russia*

Received April 5, 2024

revised version July 31, 2024

Accepted for publication August 30, 2024

Within the scope of a spherically symmetric FLRW cosmological model we have studied the role of nonlinear spinor field in evolution of the universe. It is found that if the FLRW model given by the spherical coordinates the energy-momentum tensor (EMT) of the spinor field possesses nontrivial non-diagonal components. These non-diagonal components of EMT neither depend on the spinor field nonlinearity nor on the value of parameter k defining the type of curvature of the FLRW model. The presence of such components imposes some restrictions on the spinor field. The problem is studied for open, flat and close geometries. In doing so we exploited the spinor description of sources such as perfect fluid and dark energies. Some qualitative numerical solutions are given.

DOI: 10.31857/S0044451025010043

1. INTRODUCTION

Thanks to its ability to simulate different kinds of matter such as perfect fluid, dark energy etc. spinor field is being used by many authors not only to describe the late time acceleration of the expansion, but also to study the evolution of the Universe at different stages [1–8].

It was found that the spinor field is very sensitive to spacetime geometry. Depending on the concrete type of metric the spinor field may possess different type of nontrivial non-diagonal components of the energy-momentum tensor. As a result the spinor field imposes various kinds of restrictions on both the spacetime geometry and the spinor field itself [9].

Recently spinor field is used in astrophysics to see whether its specific behavior can shed any new light in the study of objects like black hole and wormhole. Such studies were carried out within the scope of spherically symmetric [10, 11] and cylindrically symmetric spacetime [12, 13].

Since the present-day universe is surprisingly isotropic and the presence of nontrivial non-diagonal components of the spinor field leads to the severe restrictions on the spinor field, we have studied role of a spinor field in Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker (FLRW) model as well. But in those cases the space-time was given in Cartesian coordinates. In order to see influence of the coordinate transformations on spinor field some works were done by us earlier [14, 15]. In this paper we will further develop those studies and see how the spinor field behaves if the isotropic and homogeneous cosmological FLRW model given by spherical coordinates.

2. BASIC EQUATION

The action we choose in the form

$$\mathcal{S} = \int \sqrt{-g} \left[\frac{R}{2\kappa} + L_{\text{sp}} \right] d\Omega, \quad (1)$$

where $\kappa = 8\pi G$ is Einstein's gravitational constant, R is the scalar curvature and L_{sp} is the spinor field Lagrangian given by [16]

$$L_{\text{sp}} = \frac{i}{2} \left[\bar{\psi} \gamma^\mu \nabla_\mu \psi - \nabla_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \right] - m \bar{\psi} \psi - \lambda F(K). \quad (2)$$

* E-mail: bijan@jinr.ru

To maintain the Lorentz invariance of the spinor field equations the nonlinear term $F(K)$ in (2) is constructed as some arbitrary functions of invariants generated from the real bilinear forms. On account of Fierz equality in (2) we set $K = K(I, J) = b_1 I + b_2 J$, where b_1 and b_2 takes the value 0 or 1 which leads to the following expressions for $K = \{I, J, I + J, I - J\}$. Here $I = S^2$ and $J = P^2$ are the invariants of bilinear spinor forms with $S = \bar{\psi}\psi$ and $P = i\bar{\psi}\bar{\gamma}^5\psi$ being the scalar and pseudo-scalar, respectively. In (2) λ is the self-coupling constant. Note that λ can be both positive and negative, while $\lambda = 0$ leads to linear case. Here m is the spinor mass.

The covariant derivatives of spinor field takes the form [16]

$$\nabla_\mu \psi = \partial_\mu \psi - \Omega_\mu \psi, \quad \nabla_\mu \bar{\psi} = \partial_\mu \bar{\psi} + \bar{\psi} \Omega_\mu, \quad (3)$$

where Ω_μ is the spinor affine connections, defined as [16]

$$\Omega_\mu = \frac{1}{4} g_{\rho\sigma} \left(\partial_\mu e_\tau^{(b)} e_{(b)}^\rho - \Gamma_{\mu\tau}^\rho \right) \gamma^\sigma \gamma^\tau. \quad (4)$$

In (4) $\Gamma_{\mu\alpha}^\beta$ is the Christoffel symbol and the Dirac matrices in curve space-time γ are connected to the flat space-time Dirac matrices $\bar{\gamma}$ in the following way

$$\gamma_\beta = e_\beta^{(b)} \bar{\gamma}_b, \quad \gamma^\alpha = e_{(a)}^\alpha \bar{\gamma}^a, \quad (5)$$

where $e_{(a)}^\alpha$ and $e_\beta^{(b)}$ are the tetrad vectors such that

$$g_{\mu\nu}(x) = e_\mu^a(x) e_\nu^b(x) \eta_{ab}, \quad (6)$$

and fulfil following relations

$$e_{(a)}^\alpha e_\beta^{(a)} = \delta_\beta^\alpha, \quad e_{(a)}^\alpha e_\alpha^{(b)} = \delta_a^b. \quad (7)$$

Here $\eta_{ab} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ is the Minkowski spacetime. The γ matrices obey the following anti-commutation rules

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2g_{\mu\nu}, \quad \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \quad (8)$$

Varying the Lagrangian (2) with respect to $\bar{\psi}$ and ψ , respectively, we obtain the following spinor field equations

$$i\gamma^\mu \nabla_\mu \psi - m\psi - \mathcal{D}\psi - i\mathcal{G}\bar{\gamma}^5\psi = 0, \quad (9a)$$

$$i\nabla_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu + m\bar{\psi} + \mathcal{D}\bar{\psi} + i\mathcal{G}\bar{\psi}\bar{\gamma}^5 = 0, \quad (9b)$$

where $\mathcal{D} = 2\lambda F_K b_1 S$, $\mathcal{G} = 2\lambda F_K b_2 P$.

The energy momentum tensor of the spinor field is defined in the following way [16]

$$\begin{aligned} T_\mu{}^\rho &= \\ &= \frac{i}{4} g^{\rho\nu} \left(\bar{\psi} \gamma_\mu \nabla_\nu \psi + \bar{\psi} \gamma_\nu \nabla_\mu \psi - \nabla_\mu \bar{\psi} \gamma_\nu \psi - \nabla_\nu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi \right) - \\ &\quad - \delta_\mu^\rho L, \end{aligned} \quad (10)$$

which in view of (3) we rewrite as

$$\begin{aligned} T_\mu{}^\rho &= \\ &= \frac{i}{4} g^{\rho\nu} \left(\bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\nu \psi + \bar{\psi} \gamma_\nu \partial_\mu \psi - \partial_\mu \bar{\psi} \gamma_\nu \psi - \partial_\nu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi \right) - \\ &\quad - \frac{i}{4} g^{\rho\nu} \bar{\psi} \left(\gamma_\mu \Omega_\nu + \Omega_\nu \gamma_\mu + \gamma_\nu \Omega_\mu + \Omega_\mu \gamma_\nu \right) \psi - \delta_\mu^\rho L. \end{aligned} \quad (11)$$

Note that the non-diagonal components of the EMT arises thanks to the second term in (11). Moreover, let us emphasize that in view of the spinor field equations (9) the spinor field Lagrangian (2) can be expressed as

$$L = \lambda (2KF_K - F), \quad F_K = dF/dK. \quad (12)$$

We exploit this form of Lagrangian in solving Einstein equations, as they should be consistent with the Dirac one, as (12) is valid only when spinor fields obey Dirac equations (9). Let us also note that in case $F = \sqrt{K}$ the Lagrangian vanishes which is very much expected as in this case spinor field becomes linear. We are interested in nonlinear spinor field as only it can generate different kinds of source fields.

The isotropic and homogeneous cosmological model proposed by Friedmann, Lemaitre, Robertson and Walker independently is the most popular and thought to be realistic one among the cosmologists. Let us consider the FLRW model in spherical coordinates in its stanard form [17]:

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t) \left[\frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2 \vartheta d\phi^2 \right], \quad (13)$$

with k taking the values $+1, 0$ and -1 which corresponds to a close, flat and open universe, respectively. Though the value of k defines the type of geometry of space-time, in reality it is defined by the contents that filled universe. As we see later, independ to the value of k the universe filled with dark energy is always open, whereas for perfect fluid the value of k really matters. In this case depending on the value of k we obtain close, flat or open universe.

In view of (6) the tetrad we will choose in the form

$$e_0^{(0)} = 1, \quad e_1^{(1)} = \frac{a}{\sqrt{1 - kr^2}},$$

$$e_2^{(2)} = ar, \quad e_3^{(3)} = ar \sin \vartheta.$$

Then from (5) we find the following γ matrices

$$\gamma^0 = \bar{\gamma}^0, \quad \gamma^1 = \frac{\sqrt{1 - kr^2}}{a} \bar{\gamma}^1,$$

$$\gamma^2 = \frac{\bar{\gamma}^2}{ar}, \quad \gamma^3 = \frac{\bar{\gamma}^3}{ar \sin \vartheta}.$$

Further from $\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu$ one finds the γ_μ as well.

The Christoffel symbols, Ricci tensor and scalar curvature and the Einstein tensor corresponding to the metric (13) are well known and can be found in [17].

Then from (4) we find the following expressions for spinor affine connection

$$\Omega_0 = 0, \quad (14a)$$

$$\Omega_1 = \frac{1}{2\sqrt{1-kr^2}} \dot{a} \bar{\gamma}^1 \bar{\gamma}^0, \quad (14b)$$

$$\Omega_2 = \frac{1}{2} r \dot{a} \bar{\gamma}^2 \bar{\gamma}^0 + \frac{1}{2} \sqrt{1-kr^2} \bar{\gamma}^2 \bar{\gamma}^1, \quad (14c)$$

$$\Omega_3 = \frac{1}{2} \dot{a} r \sin \vartheta \bar{\gamma}^3 \bar{\gamma}^0 + \frac{1}{2} \sqrt{1-kr^2} \sin \vartheta \bar{\gamma}^3 \bar{\gamma}^1 + \frac{1}{2} \cos \vartheta \bar{\gamma}^3 \bar{\gamma}^2. \quad (14d)$$

Let us consider the case when the spinor field depends on t only, then in view of (14) the spinor field equations can be written as

$$\dot{\psi} + \frac{3}{2} \frac{\dot{a}}{a} \psi + \frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^1 \psi + \frac{\cot \vartheta}{2ar} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^2 \psi + i(m + \mathcal{D}) \bar{\gamma}^0 \psi + \mathcal{G} \bar{\gamma}^5 \bar{\gamma}^0 \psi = 0, \quad (15a)$$

$$\dot{\bar{\psi}} + \frac{3}{2} \frac{\dot{a}}{a} \bar{\psi} - \frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} \bar{\psi} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^1 - \frac{\cot \vartheta}{2ar} \bar{\psi} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^2 - i(m + \mathcal{D}) \bar{\psi} \bar{\gamma}^0 + \mathcal{G} \bar{\psi} \bar{\gamma}^5 \bar{\gamma}^0 = 0, \quad (15b)$$

Introducing $\varphi = a^{3/2} \psi$ we rewrite the equation (15)

$$\dot{\varphi} + \frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^1 \varphi + \frac{\cot \vartheta}{2ar} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^2 \varphi + i(m + \mathcal{D}) \bar{\gamma}^0 \varphi + \mathcal{G} \bar{\gamma}^5 \bar{\gamma}^0 \varphi = 0, \quad (16a)$$

$$\dot{\bar{\varphi}} - \frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} \bar{\varphi} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^1 - \frac{\cot \vartheta}{2ar} \bar{\varphi} \bar{\gamma}^0 \bar{\gamma}^2 - i(m + \mathcal{D}) \bar{\varphi} \bar{\gamma}^0 + \mathcal{G} \bar{\varphi} \bar{\gamma}^5 \bar{\gamma}^0 = 0, \quad (16b)$$

The equation (16a) can be presented in the matrix form

$$\dot{\varphi} = A\varphi, \quad (17)$$

or

$$\begin{pmatrix} \dot{\varphi}_1 \\ \dot{\varphi}_2 \\ \dot{\varphi}_3 \\ \dot{\varphi}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\mathcal{D}_1 & 0 & -\mathcal{G} & B_1 \\ 0 & -i\mathcal{D}_1 & B_1^* & -\mathcal{G} \\ \mathcal{G} & B_1 & i\mathcal{D}_1 & 0 \\ B_1^* & \mathcal{G} & 0 & i\mathcal{D}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

where

$$\mathcal{D}_1 = (m + \mathcal{D}), \quad B_1 = -\frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} + i\frac{\cot \vartheta}{2ar},$$

$$B_1^* = -\frac{\sqrt{1-kr^2}}{ar} - i\frac{\cot \vartheta}{2ar}.$$

It can be shown that

$$\det A = (\mathcal{D}_1^2 + \mathcal{G}^2 - B_1 B_1^*)^2.$$

We can choose the nonlinearity in such a way that the corresponding determinant is nontrivial. In that case the solution (17) can be formally written as [18]

$$\varphi(t) = T \exp \left(- \int_t^{t_1} A_1(\tau) d\tau \right), \quad (19)$$

where $T = \varphi(t_1)$ is the solution at $t = t_1$. Given the fact that the universe is expanding and the spinor field invariants are the inverse functions of scale factor, in case of a nonzero spinor mass one can assume

$$\varphi(t_1) = \text{col} (\varphi_1^0 e^{-imt_1}, \varphi_2^0 e^{-imt_1}, \varphi_3^0 e^{imt_1}, \varphi_4^0 e^{imt_1}),$$

whereas for a massless spinor field

$$\varphi(t_1) = \text{col} (\varphi_1^0, \varphi_2^0, \varphi_3^0, \varphi_4^0)$$

with φ_i^0 being constants.

The non-trivial components of the energy momentum tensor of the spinor field in this case read

$$T_0^0 = mS + \lambda F, \quad (20a)$$

$$T_1^1 = T_2^2 = T_3^3 = -\lambda (2KF_K - F), \quad (20b)$$

$$T_3^1 = \frac{a \cos \vartheta}{4\sqrt{1-kr^2}} A^0, \quad (20c)$$

$$T_1^0 = \frac{\cot \vartheta}{4r\sqrt{1-kr^2}} A^3, \quad (20d)$$

$$T_2^0 = -\frac{3}{4} \sqrt{1-kr^2} A^3, \quad (20e)$$

$$T_3^0 = \frac{3}{4} \sqrt{1-kr^2} \sin \vartheta A^2 - \frac{1}{2} \cos \vartheta A^1. \quad (20f)$$

From (20) we conclude that the energy-momentum tensor of the spinor field contains nontrivial non-diagonal components. The non-diagonal components

- do not depend on the spinor field nonlinearity;
- occur due to the spinor affine connections;
- appear depending on space-time geometry as well as the system of coordinates;
- impose restrictions on spinor field and/or space-time geometry;
- do not depend on the value of k which defines the type of curvature.

It should be emphasized that for a FLRW model given in Cartesian coordinate the EMT have only diagonal components with all the non-diagonal one being identically zero [19]. So in this case the non-diagonal components arise as a result of coordinate transformation. Note also that all cosmological spacetime defined by diagonal matrices of Bianchi type *VI*, *VI*₀, *V*, *III*, *I LRS – BI* and *FLRW*, but has nontrivial non-diagonal elements that differ from each other in different cases [9]. Moreover, non-diagonal metrics such as Bianchi type *II*, *VIII* and *IX* also have nontrivial non-diagonal components of EMT. Consequently, we see that the appearance of non-diagonal components of the energy-momentum tensor occurs either due to coordinate transformations or due to the geometry of space-time.

As one sees, the components of the EMT of the spinor field contains some spinor field invariants. To define those invariants let us write the system of equations for the invariants of the spinor field. It can be obtained from the spinor field equation (15):

$$\dot{S}_0 + 2\mathcal{G}A_0^0 = 0, \quad (21a)$$

$$\dot{P}_0 - 2(m + \mathcal{D})A_0^0 = 0, \quad (21b)$$

$$\begin{aligned} &\dot{A}_0^0 + 2\mathcal{G}S_0 + 2(m + \mathcal{D})P_0 + \\ &+ 2\frac{\sqrt{1 - kr^2}}{ar}A_0^1 + \frac{\cot \vartheta}{ar}A_0^2 = 0, \end{aligned} \quad (21c)$$

$$\dot{A}_0^1 + 2\frac{\sqrt{1 - kr^2}}{ar}A_0^0 = 0, \quad (21d)$$

$$\dot{A}_0^2 + \frac{\cot \vartheta}{ar}A_0^0 = 0, \quad (21e)$$

that gives the following relation between the invariants:

$$P_0^2 - S_0^2 + (A_0^0)^2 - (A_0^1)^2 - (A_0^2)^2 = C_0, \quad C_0 = \text{const.} \quad (22)$$

In (21) and (22) the quantities with a subscript «0» are related to the normal ones as follows: $X_0 = Xa^3$. From (22) we can conclude that since C_0 is an arbitrary constant, the each term of (22) should be constant as well.

In order to solve the Einstein equations we have to know how the components of the EMT are related to the metric functions. In order to know that let us find the invariant K in general. We consider the 4 cases separately.

In case of $K = I$, $\mathcal{G} = 0$. In this case from (21a) we find

$$S = \frac{C_s}{a^3}, \quad \Rightarrow K = \frac{C_s^2}{a^6}. \quad (23)$$

If $K = J$, then in case of a massless spinor field from (21b) we find

$$P = \frac{C_p}{a^3}, \quad \Rightarrow K = \frac{C_p^2}{a^6}. \quad (24)$$

Let us consider the case when $K = I + J$. In this case $b_1 = b_2 = 1$. Then on account of expression for \mathcal{D} and \mathcal{G} from (21a) and (21b) for the massless spinor field we find

$$\dot{S}_0 + 4\lambda a^3 F_K P A^0 = 0, \quad (25a)$$

$$\dot{P}_0 - 4\lambda a^3 F_K S A^0 = 0, \quad (25b)$$

which yields

$$K = I + J = S^2 + P^2 = \frac{C_1^2}{a^6}. \quad (26)$$

Finally in case when $K = I - J$, i.e. $b_1 = -b_2 = 1$ from (21a) and (21b) for the massless spinor field we find

$$\dot{S}_0 + 4\lambda a^3 F_K P A^0 = 0, \quad (27a)$$

$$\dot{P}_0 + 4\lambda a^3 F_K S A^0 = 0, \quad (27b)$$

which yields

$$K = I - J = S^2 - P^2 = \frac{C_2^2}{a^6}. \quad (28)$$

Thus we see that the invariant K is a function of metric function a , namely, $K = \text{const.} \cdot a^{-6}$ and it is what we need to solve the Einstein equation. In what follows we solve the Einstein equation.

Let us recall that the Einstein tensor G_μ^ν corresponding to the metric (13) possesses only nontrivial diagonal components. Hence the general Einstein system of equations

$$G_\mu^\nu = -8\pi G T_\mu^\nu, \quad (29)$$

leads to the following non-diagonal expressions

$$0 = T_\mu^\nu, \quad \mu \neq \nu. \quad (30)$$

In view of (20c)–(20f) from (30) one dully finds that

$$A^0 = 0, \quad A^3 = 0, \quad A^1 = (3/2)\sqrt{1 - kr^2} \operatorname{tg} \vartheta A^2. \quad (31)$$

Note that since the FLRW model given by the Cartesian coordinate the non-diagonal components of EMT are identically zero, hence relation such as (31) does not exist.

In view of $A^0 = 0$, $A^3 = 0$ from the system (21) we find

$$S_0 = C_S, \quad P_0 = C_P, \quad A_0^1 = C_0^1, \quad A_0^2 = C_0^2, \quad (32)$$

with C_S , C_P , C_0^1 and C_0^2 being some arbitrary constants. Thus we see that $K = \text{const.} a^{-6}$. Note that the equation (21c) in this case is redundant and (31) gives relations between the constants C_0^1 and C_0^2 .

We are now ready to consider the diagonal components of the Einstein system of equations which for the metric (13) takes the form

$$2\frac{\ddot{a}}{a} + \left(\frac{\dot{a}^2}{a^2} + \frac{k}{a^2}\right) = 8\pi G T_1^1, \quad (33a)$$

$$3\left(\frac{\dot{a}^2}{a^2} + \frac{k}{a^2}\right) = 8\pi G T_0^0. \quad (33b)$$

On account of (33b) we rewrite (33a) in the form

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3} (T_0^0 - 3T_1^1) = -\frac{4\pi G}{3} (\varepsilon + 3p), \quad (34)$$

where ε and p are the energy density and pressure, respectively:

$$\varepsilon = T_0^0 = mS + \lambda F, \quad (35a)$$

$$p = -T_1^1 = \lambda(2KF_K - F). \quad (35b)$$

On account of (20a) and (20b) from (34) we find

$$\ddot{a} = -\frac{4\pi G}{3} (mS - 2\lambda F + 6\lambda KF_K) a. \quad (36)$$

Note that the equations (34) or (36) do not contain k that defines the type of space-time curvature. In order to take this very important quantity into account we have to exploit (33b) as the initial condition for \dot{a} . The equation (33b) we rewrite in the form

$$\begin{aligned} \dot{a} &= \pm \sqrt{(8\pi/3) G \varepsilon a^2 - k} = \\ &= \pm \sqrt{(8\pi/3) G (mS + \lambda F) a^2 - k}, \end{aligned} \quad (37)$$

Now we can solve (36) with the initial condition given by (37). It comes out that these equations are consistent when one takes the negative sign in (37). Alternatively, one can solve (37), but for the system to be consistent he has to check whether the result satisfies (36).

As we have already established, S , K , hence $F(K)$ are the functions of a . Consequently, given the spinor field nonlinearity the foregoing equation can be solved either analytically or numerically.

The equation (36) can be solved analytically. The first integral of (36) takes the form

$$\dot{a} = \sqrt{\int f(a) da + C_c}, \quad (38)$$

where we define

$$f(a) = -\frac{8\pi G}{3} (mS - 2\lambda F + 6\lambda KF_K) a$$

and C_c is a constant which should be defined from (37). The solution to the equation (38) can be given in quadrature

$$\int \frac{da}{\sqrt{\int f(a) da + C_c}} = t. \quad (39)$$

In what follows we solve the system (33) numerically. In doing so we rewrite it in the following way:

$$\dot{a} = Ha, \quad (40a)$$

$$\dot{H} = -\frac{3}{2}H^2 - \frac{1}{2}\frac{k}{a^2} - 4\pi G\lambda(2KF_K - F), \quad (40b)$$

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} (mS + \lambda F) - \frac{k}{a^2}, \quad (40c)$$

where H is the Hubble constant.

As one sees, in the foregoing system the first two are differential equations, whereas the third one is a constraint, which we use as the initial condition for H :

$$H = \pm \sqrt{8\pi G (mS + \lambda F) / 3 - k/a^2}. \quad (41)$$

Since the expression under the square-root must be non-negative, it imposes some restrictions on the choice of initial value of a as well. Note that initial value of H depends on spinor mass m , coupling parameter λ and the value of k .

3. NUMERICAL SOLUTIONS

In what follows we solve the equations (40a) and (40b), numerically. The third equation of the system (40) we exploit as initial condition for $H(t)$ in the form (41). We do it for both massive and massless spinor field. Beside this, we consider close, flat and open universe choosing different values for k . As it was mentioned earlier, the coupling constant λ can be positive or negative. Let us recall that

$$K = \frac{K_0}{a^6}, \quad K_0 = \text{const.} \quad (42)$$

The foregoing relation holds for $K = \{I, J, I \pm J\}$ for a massless spinor field, whereas for $K = I = S^2$ it is true for both massive and massless spinor field. Hence we assume that $K = I = S^2$. We consider different kind of spinor field nonlinearities $F(K)$ (equivalently, $F(S)$), that describes various types of sources from perfect fluid to dark energy.

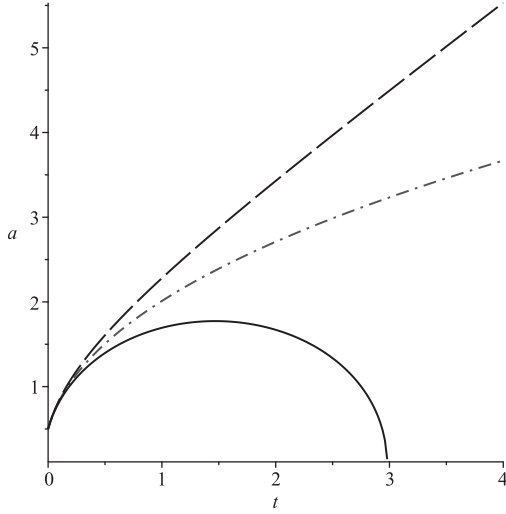


Fig. 1. Evolution of the FLRW Universe (scale factor $a(t)$) in presence of a radiation given by a massless spinor field. The blue solid, red dash-dot and black long dash lines stand for close, flat and open ($k = +1, 0, -1$) universe, respectively

3.1. Barotropic equation of state

Let us consider the case when the Universe is filled with perfect fluid or dark energy given by quintessence, Λ -term or phantom matter. It can be implemented by the barotropic equation of state (EoS), which gives a linear dependence between the pressure and energy density and was exploited by many authors [20–23]. The corresponding EoS takes the form

$$p = W\varepsilon, \quad (43)$$

where the EoS parameter W is a constant. Depending on the value of W , the Eq. (43) can give rise to both perfect fluid, such as dust, radiation etc. and dark energy such as quintessence, cosmological term, phantom matter etc. For $W \in [0, 1]$, it describes a perfect fluid. The value $W = -1$ represents a typical cosmological constant (Λ -term) [24–26], whereas $W \in [-1, -1/3]$ gives rise to a quintessence, while for $W < -1$ it ascribes a phantom matter.

It was shown in [9, 27] that inserting (35) into (43) the matter or energy corresponding to Eq. (43) can be simulated by the nonlinear term given by

$$F(S) = \lambda S^{1+W} - mS, \quad \lambda = \text{const.}, \quad (44)$$

in the spinor field Lagrangian (2).

Let us now solve (40) numerically for the nonlinear term given by (44). We consider both massive and massless spinor field. The values of W are

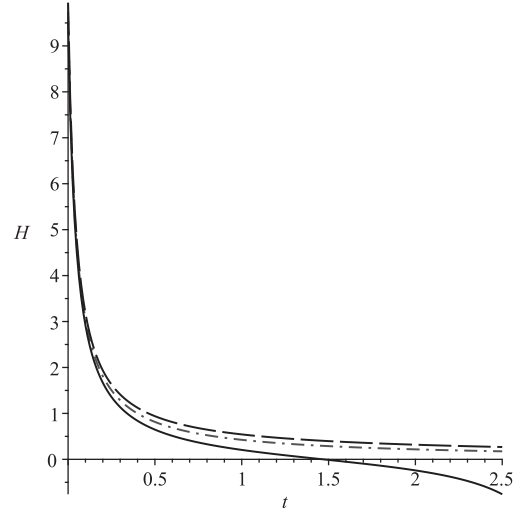


Fig. 2. Evolution of the corresponding Hubble parameter $H(t)$ and corresponds to differnt values of k as in Fig. 1

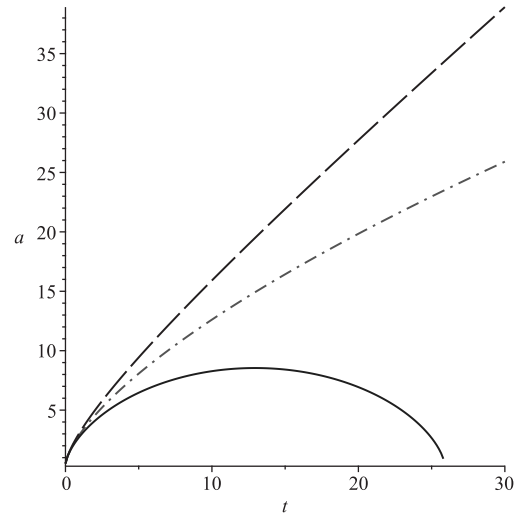


Fig. 3. Evolution of the FRW Universe (scale factor $a(t)$) in presence of a radiation given by a massive spinor field. The blue solid, red dash-dot and black long dash lines stand for $k = +1, 0, -1$, respectively

taken to be $1/2$, $-1/2$ and -1 describing the radiation, quintessence and cosmological constant, respectively. For simplicity we set $S_0 = 1$, $G = 1$, $\lambda = 0.5$ here and in the cases to follow. We also set $m = 0$ for a massless and $m = 1$ for a massive spinor field.

In Fig. 1 we have illustrated the evolution of the Universe filled with radiation, given by a massless spinor field, while Fig. 2 shows the evolution of the Hubble parameter corresponding to the case in ques-

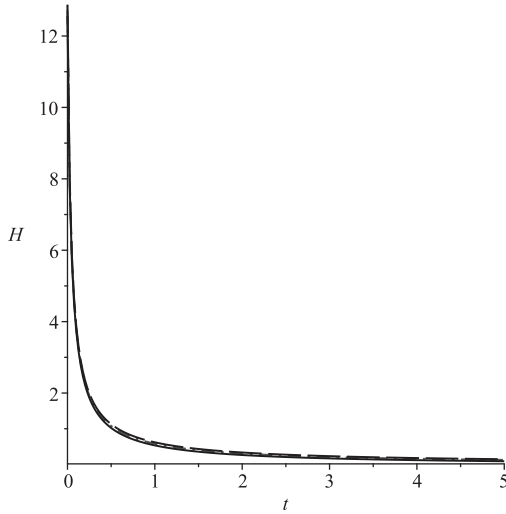


Fig. 4. Evolution of the corresponding Hubble parameter $H(t)$

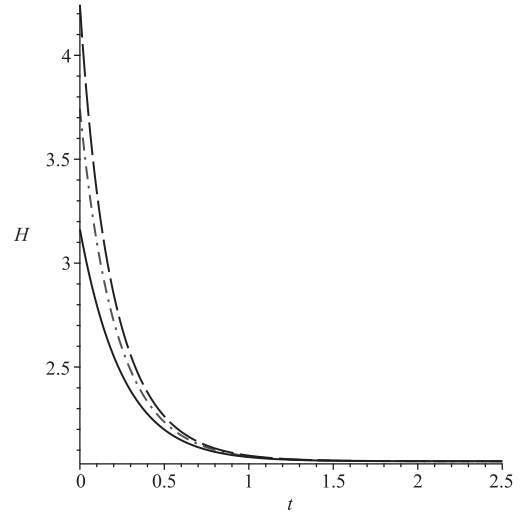


Fig. 6. Evolution of the corresponding Hubble parameter $H(t)$

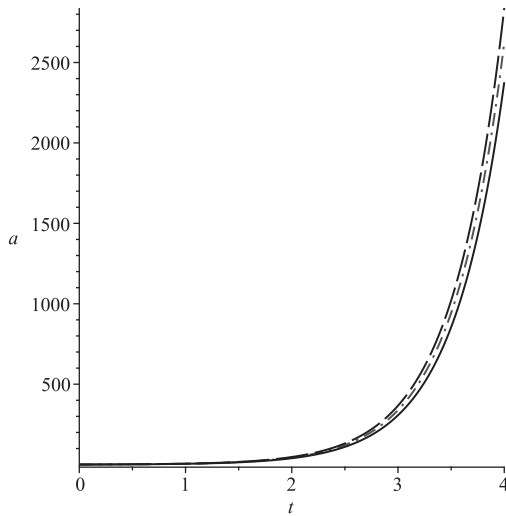


Fig. 5. Evolution of the FRW Universe (scale factor $a(t)$) in presence of a modified Chaplygin gas given by a massless spinor field. As one sees, independent to the value of k in this case the universe expand rapidly

tion. Figs. 3 and 4 describes the evolution of the Universe filled with radiation and the corresponding Hubble parameter in case of a massive spinor field. In the figures blue solid line stands for a closed universe given by $k = 1$, red dash-dot line stands for a flat universe with $k = 0$ and black long dash line stands for an open universe with $k = -1$.

We have also considered the case with the spinor field nonlinearity describing a quintessence ($W = -1/2$) and cosmological constant ($W = -1$).

Both massive and massless spinor fields are taken into account. Since in both cases the energy density is less than the critical density, independent to the value of k we have only open type of universe. The behavior of the evolution is qualitatively same as that of in case of a modified Chaplygin gas. The corresponding figures will be similar to those in Figs. 5 and 6, only the rate of expansion being much slower.

3.2. Chaplygin gas

In order to combine two different physical concepts such as dark matter and dark energy, and thus reduce the two physical parameters in one, a rather exotic equation of state was proposed in [28] which was further generalized in the works [29, 30]. Generalized Chaplygin gas model is given by the EoS

$$p_{\text{ch}} = -A/\varepsilon_{\text{ch}}^\alpha, \quad (45)$$

where A is a positive constant and $0 < \alpha \leq 1$.

It was shown that such kind of dark energy can be modeled by the massless spinor field with the nonlinearity [9] inserting (35) into (45)

$$F(S) = (A + \lambda S^{1+\alpha})^{1/(1+\alpha)}. \quad (46)$$

We have solved (40) numerically for the nonlinear term given by (46). We consider only massless spinor field setting $m = 0$. The parameters S_0 , G and λ were taken as in previous case. We have also set $A = 1/2$ and $\alpha = 1/3$.

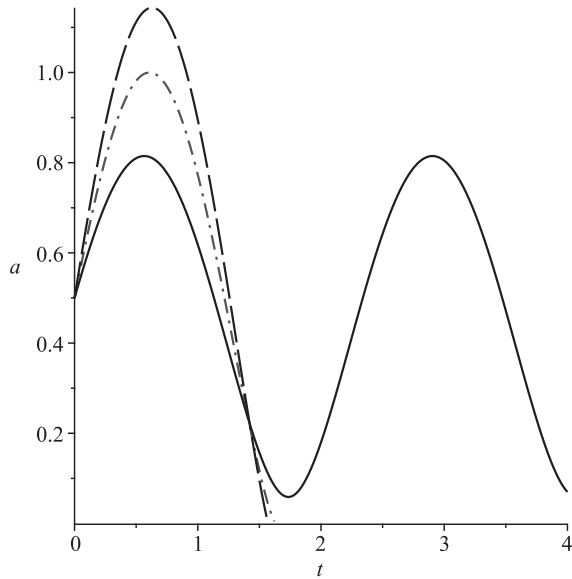


Fig. 7. Evolution of the FRW Universe (scale factor $a(t)$) in presence of a modified quintessence given by a massless spinor field. In case of $k = +1$ there occurs a periodic solution, whereas for $k = 0$ or $k = -1$, we have Big Crunch like solutions

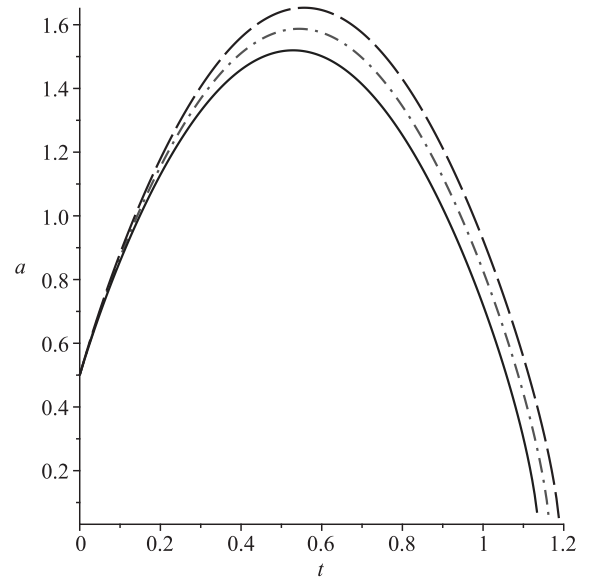


Fig. 9. Evolution of the FRW Universe (scale factor $a(t)$) in presence of a modified quintessence given by a massive spinor field. Unlike massless spinor field, in this case there is no periodic solutions for the given value of problem parameters

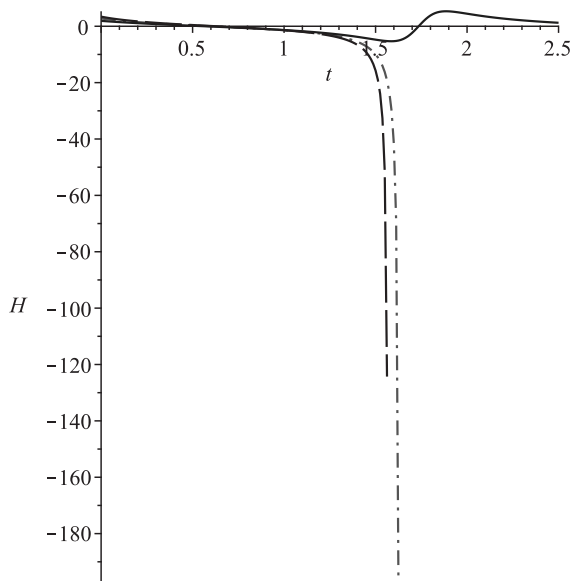


Fig. 8. Evolution of the corresponding Hubble parameter $H(t)$

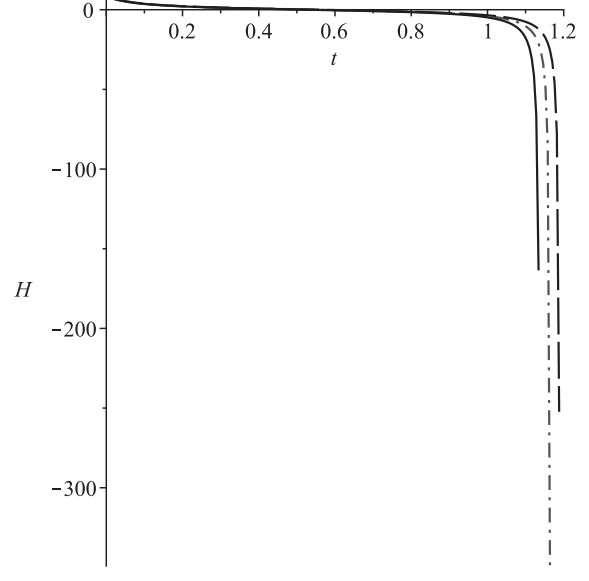


Fig. 10. Evolution of the corresponding Hubble parameter $H(t)$

As in case of quintessence and cosmological constant, the evolution of the universe filled with Chaplygin gas and corresponding behavior of the Hubble parameter are qualitatively same as in case of a modified Chaplygin gas which are illustrated in Figs. 5 and 6. The expansion rate in this case is higher than the previous case but slower than in the case to follow.

3.3. Modified Chaplygin gas

Though the dark energy and the dark matter act in a completely different way, many researchers suppose that they are different manifestations of a single entity. Following such an idea a modified Chaplygin gas was introduced in [31] and was further developed in [32]. Corresponding EoS takes the form

$$p = W\varepsilon - A/\varepsilon^\alpha, \quad (47)$$

with W being a constant, $A > 0$ and $0 \leq \alpha \leq 1$.

Inserting (35) into (47) the modified Chaplygin gas can be generated by a massless spinor field with the nonlinearity given by [9]

$$F(S) = \left[\frac{A}{1+W} + \lambda S^{(1+\alpha)(1+W)} \right]^{1/(1+\alpha)}. \quad (48)$$

In fact, mathematically it is a combination of quintessence and Chaplygin gas. We have solved (40) numerically for the nonlinear term given by (48). Since we consider only massless spinor field, we set $m = 0$. For simplicity we set S_0 , G , λ , A , and α as in previous cases. Beside that we set $W = -1/2$.

In Figs. 5 and 6 we have illustrated the evolution of the universe and corresponding Hubble parameter when the Universe is filled with nonlinear spinor field simulating a modified Chaplygin gas.

3.4. Modified quintessence

A modified Quintessence was proposed in order to avoid eternal acceleration of the universe. In some cases it gives cyclic universe that pops up from a Big Bang singularity, expands to some maximum value and then decreases and finally ends in Big Crunch. In some cases it might be periodic without singularity. A spinor description of a modified quintessence was proposed in [23]

$$p = W(\varepsilon - \varepsilon_{\text{cr}}), \quad W \in (-1, 0), \quad (49)$$

with ε_{cr} being some critical energy density. The model gives rise to cyclic or oscillatory universe. Setting $\varepsilon_{\text{cr}} = 0$ one obtains ordinary quintessence. As one sees from (49), the pressure is negative as long as $\varepsilon > \varepsilon_{\text{cr}}$. Since with the expansion of the universe the energy density decreases, at some moment of time ε becomes less than ε_{cr} , i.e., $\varepsilon < \varepsilon_{\text{cr}}$. This leads to the positive pressure and the contraction of the universe. It can be shown that a modified quintessence can be modeled by a spinor field nonlinearity inserting (35) into (49)

$$F(S) = \lambda S^{1+W} + \frac{W}{1+W} \varepsilon_{\text{cr}}. \quad (50)$$

We solve the system (40) for the values of parameters as in case of quintessence. For critical density we set $\varepsilon_{\text{cr}} = 1$.

In Figs. 7 and 8 we have illustrated the evolution of the universe and corresponding Hubble parameter when the universe is filled with nonlinear massless

spinor field simulating a modified quintessence. The corresponding cases with massive spinor field are illustrated in Figs. 9 and 10

In the figures, evolution of Hubble parameter H is drawn for a much smaller time interval than the scale factor a . It is just for technical reason. For example, if in Figs. 3 and 4 we use interval 30 for both a and H , as we see from Fig.4 Hubble parameter after crossing mark 5 it becomes almost zero, thus giving rise to a visually ugly picture. Whereas, setting interval 5 for both, we have a on rising phase for all three values of k [cf. Fig. 3]. These two figures correspond to the same values of problem parameter, only for good visual pictures we have drawn them for different intervals. The same can be told for all other cases.

4. CONCLUSION

Within the scope of a spherically symmetric FLRW model we have studied the role of a nonlinear spinor field in the evolution of the universe. It is found that in this case the spinor field possesses nontrivial non-diagonal components of the EMT. Since the Einstein tensor in this case is diagonal, this fact imposes some restrictions on the components of spinor field: $A^0 = 0$, $A^3 = 0$ and $A^1 \propto A^2$. Corresponding equations are solved. It is shown that if the spinor field nonlinearity represents ordinary matter such as radiation, the factor k plays decisive role giving rise to close, flat or open universe depending on its positive, trivial or negative values. It is also shown that in this case spinor mass influences the result quantitatively. If the spinor field nonlinearity generates a dark energy we have only rapidly expanding universe independent to the value of k . Finally in case of a modified quintessence the model gives rise to an oscillating universe. Depending on the value of k and spinor mass m_{sp} there might be periodic solutions or the one that ends in Big Crunch.

Funding. This paper has been supported by the RUDN University Strategic Academic Leadership Program.

REFERENCES

1. M. O. Ribas, F. P. Devecchi, and G. M. Kremer, Phys. Rev. D **72**, 123502 (2005).
2. B. Saha, Phys. Rev. D **74**, 124030 (2006).

3. B. Saha Gravitation and Cosmology **12**, 215 (2006).
4. B. Saha and V. S. Rikhvitsky, Phys. Part. Nucl. **40**, 612 (2009).
5. L. Fabbri, Int. J. Theor. Phys. **52**, 634 (2013).
6. L. Fabbri, Phys. Rev. D **85**, 047502 (2012).
7. S. Vignolo, L. Fabbri, and R. Cianci, J. Math. Phys. **52**, 112502 (2011).
8. N. J. Popławski, Phys. Rev. D **85**, 107502 (2012).
9. B. Saha, Phys. Part. Nucl. **49**, 146 (2018).
10. B. Saha Eur. Phys. J. Plus **133** 461 (2018).
11. K. A. Bronnikov, Yu. P. Rybakov, and Saha B. Saha, Eur. Phys. J. Plus **135** 124 (2020).
12. B. Saha, Universe **6**, 152 (2020).
13. B. Saha, Eur. Phys. J. Plus **137** 1063 (2022).
14. B. Saha, E. I. Zakharov, and V. S. Rikhvitsky, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **28**, 132 (2020).
15. A. S. Gavrikov, B. Saha, and V. S. Rikhvitsky, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **28**, 120 (2020).
16. B. Saha, Phys. Rev. D **64**, 123501 (2001).
17. J. V. Narlikar *Introduction to Relativity*, Cambridge University Press, NY (2010).
18. B. Saha, Eur. Phys. J. Plus **131** 170 (2016).
19. Saha B. Saha, AstroPhys. Space Sci. **365**, 68 (2020).
20. R. R. Caldwell, Phys. Lett. B **545**, 23 (2002).
21. V. Sahni and A. A. Starobinsky, Int. J. Mod. Phys. D **9**, 373 (2000).
22. I. Zlatev, L. Wang, and P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **82**, 896 (1999).
23. B. Saha, Int. J. Theor. Phys. **45**, 983 (2006).
24. T. Padmanabhan, Phys. Reports **380**, 235 (2003).
25. V. Sahni, Lecture Notes on Phys. **653**, 141 (2004).
26. B. Saha, Astrophys. Space Sci. **302**, 83 (2006).
27. B. Saha, Astrophys. Space Sci. **331**, 243 (2011).
28. A. Yu. Kamenshchik, U. Moschella, and V. Pasquier, Phys. Lett. B **511**, 265 (2001).
29. N. Bilic, G. B. Tupper, and R. D. Viollier, Phys. Lett. B **353**, 17 (2002).
30. M. C. Bento, O. Bertolami, and A. A. Sen, Phys. Rev. D **66**, 043507 (2002).
31. H. B. Benaoum, Universe **8**, 340 (2022).
32. H. B. Benaoum, Adv. High Energy Phys. 2012:357802 (2012).

КВАНТОВЫЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОНА С НУЛЕВОЙ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИЕЙ

В. П. Незнамов^{}, В. Е. Шемарулин*

*ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 21 апреля 2024 г.,
после переработки 2 сентября 2024 г.
Принята к публикации 2 сентября 2024 г.

На основе модернизированных регулярных заряженных метрик Райсснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена с квантовыми ядрами мы предлагаем две модели электрона с нулевой собственной энергией.

DOI: 10.31857/S0044451025010055

1. ВВЕДЕНИЕ

С момента появления Общей теории относительности (ОТО) начались попытки построения моделей элементарных частиц в искривленном пространстве-времени. Среди авторов таких моделей можно назвать Дж. Б. Джеффри (G. B. Jeffery) (1921), П. А. М. Дирака (P. A. M. Dirac) (1962), В. Израэля (W. Israel) (1970), К. А. Лопеса (C. A. López) (1984), О. Грона (O. Gron) (1984), А. Буринского (1974–2023) и др. К сожалению, все предложенные модели не нашли своего использования в практических расчетах классической и квантовой теории поля.

Второй проблемой, над решением которой работали многие ученые и о которой мы будем говорить в нашей работе, является проблема бесконечной собственной энергии заряженной частицы в классической и квантовой электродинамике. Линейную расходимость собственной энергии в классической электродинамике пытались устранить А. Пуанкаре, М. Борн, Л. Инфельд, П. А. М. Дирак, Дж. Уилер, Р. Фейнман (H. Poincaré, M. Born, L. Infeld, P. A. M. Dirac, J. Wheeler, R. Feynman) и др. Для устранения логарифмической расходимости собственной энергии в квантовой теории поля была разработана процедура перенормировки масс фермионов.

Подобные работы продолжают и в наше время. Например, в [1, 2] в квантовой электродинамике

собственная энергия точечного заряда сходится при учете нелинейности теории в любом конечном порядке разложения лагранжиана Эйлера–Гейзенберга по степеням электрического поля.

В нашей работе на примере электрона мы предлагаем две квантовые модели заряженных элементарных частиц с нулевыми собственными энергиями. При этом, используя квантовую геометрию Райсснера–Нордстрема и пренебрегая чрезвычайно малыми гравитационными коэффициентами, можно все практические расчеты эффектов классической и квантовой электродинамики проводить в парадигме элементарных частиц с точечными массами и электрическими зарядами.

За основу нами было взято феноменологическое описание квантовых черных дыр для модифицированных геометрий Шварцшильда (Sq) и Райсснера–Нордстрема (RNq) [3, 4]. В этом подходе черные дыры содержат квантовые ядра, описываемые когерентными состояниями гравитонов. Средние по когерентным состояниям решения безмассового уравнения Клейна–Гордона для продольных гравитонов приравниваются с определенными коэффициентами классическим потенциалам. Устранение коротких длин волн проводится обрезанием (cut-off) энергии гравитонов. В теории появляется максимальная энергия гравитонов

$$k_{UV} = \frac{\hbar c}{R_S}. \quad (1)$$

Здесь для удобства, как в [3, 4], мы вводим параметр R_S . Первичным в теории является максимальная энергия гравитонов k_{UV} . Наличие квантового

^{*} E-mail: vpneznamov@vniief.ru, vpneznamov@mail.ru

ядра дает рост квантовым волосам. Квантовые черные дыры имеют квантовые волосы.

В будущей квантовой теории гравитации обрезание по энергии гравитонов k_{UV} будет заменено строгим интегрированием, а отсутствие коротких длин волн в когерентных состояниях гравитонов будет естественным результатом применения более совершенной квантовой теории.

В нашей работе [5] мы распространили подход [3, 4] на модифицированные геометрии Керра (Kq) и Керра–Ньюмена (KNq), описывающие регулярные незаряженные и заряженные квантовые вращающиеся коллапсары. Здесь, как и в случае геометрии RNq, это название включает в себя либо черные дыры с квантовыми ядрами и с горизонтами событий, либо вращающиеся квантовые ядра без горизонтов событий.

В работе [5] для заряженных вращающихся коллапсаров с массой M , зарядом Q и угловым моментом J при значении параметра

$$R_S = R_S^{reg} = \frac{\pi}{8} \frac{Q^2}{Mc^2} \quad (2)$$

мы получили полную регуляризацию квантовых метрик KNq с конечными значениями таких величин ОТО, как массовая функция $m_{KNq}(r)$, тензор Риччи $R_{\mu\nu}(r, \theta)_q$, скаляр Кретчмана $K_q(r, \theta)$ и т.д.

При $R_S = R_S^{reg}$ полная энергия квантового заряженного вращающегося коллапсара равна $E = Mc^2$, т.е. собственная энергия коллапсара равна нулю. Из-за наличия квантового ядра электромагнитные силы, ответственные за собственную энергию коллапсара, компенсируются гравитационными силами.

Аналогичные результаты получаются и для квантовой метрики RNq [4].

В разд. 2 на основе квантовых геометрий RNq и KNq мы предлагаем две квантовые модели электрона с нулевыми собственными энергиями. В разд. 3 сравниваются модели электронов друг с другом и отдается некоторое предпочтение модели с квантовой геометрией RNq. В Заключение сформулирован основной результат статьи.

В Приложении приведена процедура расчета энергии заряженной вращающейся черной дыры с квантовым ядром (см. [5]).

2. КВАНТОВЫЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОНА

На основе регулярных квантовых моделей заряженных вращающихся и невращающихся черных дыр [4, 5] мы предлагаем к рассмотрению две

квантовые модели электрона с модифицированными метриками KNq и RNq.

2.1. Модифицированная геометрия Керра–Ньюмена

Для модели электрона мы будем использовать метрику Cürses–Cürsey [6]¹⁾:

$$ds_{KNq}^2 = \left(1 - \frac{2r m_{KNq}^e(r)}{\rho^2}\right) dt^2 + \frac{4a_e r m_{KNq}^e(r) \sin^2 \theta}{\rho^2} dt d\varphi - \frac{\rho^2}{\Delta} dr^2 - \rho^2 d\theta^2 - \frac{\Sigma \sin^2 \theta}{\rho^2} d\varphi^2, \quad (3)$$

где $m_{KNq}^e(r)$ — массовая функция,

$$\rho^2 = r^2 + a_e^2 \cos^2 \theta, \quad (4)$$

$$\Delta = r^2 - 2r m_{KNq}^e(r) + a_e^2, \quad (5)$$

$$\Sigma = (r^2 + a_e^2)^2 - a_e^2 \Delta \sin^2 \theta, \quad (6)$$

$$a_e = \frac{|J_e|}{m_e} = \frac{\hbar}{2m_e}. \quad (7)$$

В выражении (7) m_e — масса электрона, $|J_e| = \hbar/2$ — спин электрона.

В общем случае для черной дыры с массой M , зарядом Q и угловым моментом J массовые функции $m(r)$ для классических и квантовых метрик Керра (K) и Керра–Ньюмена (KN) не зависят от параметра вращения $a = J/M$ и соответственно равны массовым функциям для классических и квантовых метрик Шварцшильда и Райсснера–Нордстрема.

Для электрона квантовая массовая функция равна

$$\begin{aligned} m_{KNq}^e(r) &= m_{RNq}^e(r) = \\ &= Gm_e \frac{2}{\pi} \text{Si} \left(\frac{k_{UV}^e r}{\hbar c} \right) - \frac{Ge^2}{2r} \left[1 - \cos \left(\frac{k_{UV}^e r}{\hbar c} \right) \right] = \\ &= Gm_e \frac{2}{\pi} \text{Si} \left(\frac{r}{R_S^e} \right) - \frac{Ge^2}{2r} \left[1 - \cos \left(\frac{r}{R_S^e} \right) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin x'}{x'} dx'$ — интегральный синус. Согласно (2),

$$R_S^e = \frac{\pi}{8} \frac{e^2}{m_e c^2} = 1.11 \cdot 10^{-13} \text{ см}. \quad (9)$$

¹⁾ Ниже мы будем использовать единицы со скоростью света $c = 1$. При вычислении численных значений параметров теории будет использоваться значение $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$.

Согласно (1), максимальная (cut-off) энергия гравитонов равна

$$k_{UV}^e = \frac{\hbar c}{R_S^e} = 178 \text{ МэВ.}$$

Асимптотики квантовой массовой функции (8) имеют вид

$$m_{KNq}^e|_{r \rightarrow \infty} = Gm_e, \quad (10)$$

$$m_{KNq}^e|_{r \rightarrow 0} = \frac{1}{18} \frac{Gm_e}{\pi} \left(\frac{r}{R_S^e} \right)^3 \rightarrow 0. \quad (11)$$

Согласно (10), квантовая метрика КН при $r \rightarrow \infty$ становится асимптотически плоской.

Для классической метрики КН массовая функция $m_{KN}^{cl} = 0$ при $r_e = e^2/2m_e$, т. е. при $r = r_e$ классическая метрика является плоской [7]. Для квантовых метрик Кq и КNq в интервале $r \in (0, \infty)$ всюду присутствует искривленное пространство-время [5].

2.2. Модифицированная геометрия Райсснера – Нордстрема

Квантовую метрику RNq [4] можно получить из выражения (3), полагая $a_e = 0$:

$$ds_{RNq}^2 = \left(1 - \frac{2m_{RNq}^e(r)}{r} \right) dt^2 - \frac{1}{1 - \frac{2m_{RNq}^e(r)}{r}} dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad (12)$$

где $m_{RNq}^e(r)$ приведено в (8).

Квантовая метрика RNq при $r \rightarrow \infty$ является асимптотически плоской (см. (10)). Компонента $g_{00} = -1/g_{11}$ при $r \rightarrow 0$ равна

$$g_{00} = 1 - \frac{Gm_e}{9\pi c^2 R_S^e} \left(\frac{r}{R_S^e} \right)^2 = 1 - 2.15 \cdot 10^{-44} \left(\frac{r}{R_S^e} \right)^2, \quad (13)$$

т. е. при $r = 0$ метрика (12) становится плоской.

2.3. Характеристики моделей электрона

Приведем применительно к электрону некоторые характерные числа:

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ г}, \quad e^2 = 2.31 \cdot 10^{-19} \text{ эрг} \cdot \text{см},$$

$$\text{спин: } \frac{\hbar}{2} = 0.5 \cdot 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с},$$

$$G = 6.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{см}^3}{\text{г} \cdot \text{с}^2}, \quad c = 3 \cdot 10^{10} \frac{\text{см}}{\text{с}},$$

$$R_H^e = \frac{2Gm_e}{c^2} = 1.35 \cdot 10^{-55} \text{ см},$$

$$\frac{Ge^2}{c^4} = (1.38 \cdot 10^{-34})^2 \text{ см}^2,$$

$$a_e^2 = \left(\frac{\hbar}{2m_e c} \right)^2 = (1.93 \cdot 10^{-11})^2 \text{ см}^2,$$

$$\beta_1 = \frac{Ge^2}{c^4} \frac{4}{(R_H^e)^2} = 4.2 \cdot 10^{42},$$

$$\beta_2 = \frac{4a_e^2}{(R_H^e)^2} = 8.2 \cdot 10^{88}, \quad \text{т. е. } \beta_1 + \beta_2 \gg 1,$$

$$R_{cl} = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.82 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

$$R_S^e = \frac{\pi}{8} \frac{e^2}{m_e c^2} = 1.11 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

$$k_{UV}^e = \frac{\hbar c}{R_S^e} = 178 \text{ МэВ},$$

$$\frac{R_S^e}{R_H^e} = \frac{1.11 \cdot 10^{-13}}{1.35 \cdot 10^{-55}} = 0.82 \cdot 10^{42}.$$

Мы видим, что для электрона $\beta_1 + \beta_2 \gg 1$, $R_S^e/R_H^e \gg 1$. Это означает, что в моделях электрона с квантовыми метриками RNq и КNq отсутствуют горизонты событий [8]. Предлагаемые модели электрона представляют собой либо вращающиеся (КNq), либо невращающиеся (RNq) коллапсары без горизонтов событий и с квантовыми ядрами, определяемыми когерентными состояниями гравитонов с максимальной энергией $k_{UV}^e = 178 \text{ МэВ}$.

2.4. Электромагнитные потенциалы

Для классических метрик Райсснера – Нордстрема и Керра – Ньюмена с массой M и зарядом Q массовая функция состоит из двух слагаемых:

$$m^{cl}(r) = (m^{cl}(r))_M + (m^{cl}(r))_Q = GM - \frac{GQ^2}{2r}. \quad (14)$$

«Зарядная» часть массовой функции

$$(m^{cl}(r))_Q = -GQ^2/2r$$

обеспечивает равенство «зарядных» частей компонент тензора Эйнштейна, разделенных на $8\pi G$, с соответствующими компонентами тензора энергии-импульса электромагнитного поля, определенными из уравнений Максвелла,

$$\frac{(G_\mu{}^\nu)_Q}{8\pi G} = (T_\mu{}^\nu)_{em}.$$

При этом для классической геометрии КН электромагнитные потенциалы A_μ выбираются в форме [9]

$$A_\mu = \frac{Qr}{\rho^2} (1, 0, 0, -a \sin^2 \theta). \quad (15)$$

Электромагнитные поля при $r \rightarrow \infty$ проявляют себя в виде суперпозиции кулоновского поля и поля магнитного диполя $\mu = Qa$. Гиромагнитное отношение $\mu/|J| = Q/m$, что совпадает с гиромагнитным отношением для дираковского электрона. Сложная внутренняя электромагнитная структура источника классической метрики КН представлена, например, в работе [10].

Для классической метрики Райсснера–Нордстрема (RN) ($a = 0$) в (15) остается только скалярный кулоновский потенциал $A_0 = Q/r$.

Для регулярных квантовых метрик электрона (с учетом связи m_e и e^2 в (9)) «зарядную» часть массовой функции можно оставить такой же, что и для классических метрик RN и KN. Тогда массовая функция (8) будет равна

$$m_{RNq}^e(r) = m_{KNq}^e(r) = Gm_e \left[\frac{2}{\pi} \text{Si} \left(\frac{r}{R_S^e} \right) + \frac{4}{\pi} \frac{\cos(r/R_S^e)}{r/R_S^e} \right] - \frac{Ge^2}{2r}. \quad (16)$$

В этом случае электромагнитные свойства предлагаемых моделей электрона совпадают с электромагнитными свойствами источников классических метрик Райсснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена.

2.5. Собственная энергия электрона

В работе [5] мы установили, что при

$$R_S = R_S^{reg} = \pi Q^2/8M$$

энергия вращающейся заряженной квантовой черной дыры равна $E = M$ (см. также Приложение). Аналогичное равенство справедливо для квантовой метрики RNq при любом значении R_S . Для моделей электрона в естественных единицах

$$R_S^e = \pi e^2/8m_e c^2 = 1.11 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Равенство $E = m_e$ означает, что собственная энергия электрона E_{em} равна нулю.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Итак, мы рассмотрели две квантовые модели электрона на основе модифицированных метрик

Таблица. Сравнение характеристик моделей электрона в квантовых геометриях Райсснера–Нордстрема (RNq) и Керра–Ньюмена (KNq)

	Характеристика моделей электрона	RNq	KNq
1	$E_e = m_e, E_{em} = 0$	+	+
2	Слабое энергетическое условие	+	–
3	$ J = \hbar/2$, дираковское гиромагнитное отношение $\mu/ J = e/m_e$	–	+
4	Отсутствие горизонтов событий	+	+
5	Конечность величин ОТО, таких как массовая функция, тензор Риччи, скаляр Кретчмана и т. д.	+	+
6	Совместимость с уравнениями Максвелла	+	+
7	Стационарные связанные состояния в полях регулярных черных дыр	+	–

Райсснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена. Можно ли на данном этапе отдать предпочтение какой-либо одной модели? Для ответа на этот вопрос проведем сравнение некоторых характеристик рассмотренных моделей. Сравнение проведем при

$$R_S = R_S^e = \frac{\pi e^2}{8m_e}.$$

В таблице знаками «+», «–» обозначено присутствие или отсутствие ключевых характеристик рассмотренных моделей.

Кратко обсудим пункты 1–7 таблицы.

Пункт 1. Для обеих моделей

$$E_e = m_e c^2, E_{em} = 0.$$

Мы обнаружили важный аспект: гравитация в заряженных квантовых метриках Керра–Ньюмена (с вращением) и Райсснера–Нордстрема (без вращений) при $R_S = R_S^e$ компенсирует электромагнитную составляющую в выражениях для полной энергии квантовой черной дыры.

В классической электродинамике собственная энергия заряженной частицы $E_{em}^{cl} = e^2/2r$ линейно расходится при $r \rightarrow 0$. В квантовой теории поля собственная энергия заряженной частицы определяется бесконечным рядом теории возмущений со слагаемыми с логарифмической расходимостью.

Пункт 2. Для квантовой геометрии RNq плотность энергии $\rho_e(r)$, радиальное давление $p_1(r)$, на-

пряжения $p_2(r) = p_3(r)$ имеют вид [4]

$$\rho_\varepsilon(r) = -p_1(r) = \frac{m_e}{\pi^2 (R_S^e)^3} \times \left[\frac{1}{(r/R_S^e)^4} \left(1 - \cos\left(\frac{r}{R_S^e}\right) \right) - \frac{1}{2(r/R_S^e)^3} \sin\left(\frac{r}{R_S^e}\right) \right], \quad (17)$$

$$p_2(r) = p_3(r) = \frac{m_e}{\pi^2 (R_S^e)^3} \times \left[\frac{1}{(r/R_S^e)^4} \left(1 - \cos\left(\frac{r}{R_S^e}\right) \right) + \frac{1}{4(r/R_S^e)^2} \cos\left(\frac{r}{R_S^e}\right) - \frac{3}{4(r/R_S^e)^3} \sin\left(\frac{r}{R_S^e}\right) \right]. \quad (18)$$

При $r \rightarrow 0$ имеем $\rho_\varepsilon(r) \rightarrow K/24$, $p_i(r) \rightarrow -K/24$, где $i = 1, 2, 3$ и $K = m_e/\pi^2 (R_S^e)^3$. Отсюда следует, что для квантовой геометрии RNq в окрестности $r = 0$ выполняется слабое энергетическое условие $\rho_\varepsilon \geq 0$, $\rho_\varepsilon + p_i \geq 0$, $i = 1, 2, 3$.

Конкретно формулы (17), (18) показывают, что при $r = 0$ $\rho_\varepsilon = K/24$, $\rho_\varepsilon + p_i = 0$, $i = 1, 2, 3$.

Для квантовой геометрии RNq при $r = 0$ выполняется также условие энергодоминантности $\rho_\varepsilon \geq |p_i|$, $i = 1, 2, 3$. В нашем случае $\rho_\varepsilon = |p_i|$.

Для квантовой геометрии Керра–Ньюмена асимптотики плотности энергии $\rho_\varepsilon(r, \mu)$ при $r \rightarrow 0$ получаются из формулы (7) в [5] (здесь и ниже $\mu = \cos \theta$):

$$\rho_\varepsilon(r, \mu) = \frac{K}{12} \frac{\mu^2 - 1}{\mu^4} \left(\frac{r}{a_e} \right)^2, \quad \mu \neq 0, \quad (19)$$

$$\rho_\varepsilon(r, \mu) = 84K, \quad \mu = 0.$$

При $\mu \neq 0, \pm 1$ плотность энергии в окрестности $r = 0$ отрицательна. В этом случае не удовлетворяется ни одно энергетическое условие.

Пункт 3. В квантовой модели KNq можно ввести модуль спина $|J| = \hbar/2$, при этом выполняется дираковское гиромангнитное отношение. Однако введение квантового оператора спина $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ затруднительно при классическом определении углового момента в геометрии Керра–Ньюмена. Выше σ_i — двумерные матрицы Паули.

В квантовой геометрии RNq угловой момент J равен нулю. В квантовой модели электрона с геометрией RNq предполагается, что оператор спина \mathbf{S} и гиромангнитное отношение e/m_e являются чисто квантовыми свойствами, заданными извне.

Пункт 4. В обеих моделях отсутствуют горизонты событий.

Пункт 5. В обеих моделях величины ОТО, такие как массовая функция, тензор Риччи, скаляр Кретчмана и т.д., являются конечными.

Пункт 6. Квантовые геометрии RNq и KNq совместимы с уравнениями Максвелла (см. разд. 2.4 данной работы). Однако, безусловно, электромагнитная структура модели RNq значительно проще, чем электромагнитная структура модели KNq. Источником электромагнитного поля в квантовой модели RNq является точечный электрический заряд e , расположенный в центре системы ($r = 0$). На больших расстояниях электромагнитное поле стремится к кулоновскому полю.

Источником электромагнитного поля в квантовой модели KNq является система токов и поверхностных электрических зарядов, распределенных по диску радиуса $a_e = |J_e|/m_e c$ с центром в $r = 0$ [10].

При $r \rightarrow \infty$ электромагнитное поле является суперпозицией кулоновского поля и поля магнитного диполя $\mu = ea$.

Пункт 7. В квантовой геометрии RNq метрика (12) становится асимптотически плоской при $r \rightarrow \infty$, и важно, что при $R_S = R_S^e$ и $r \rightarrow 0$ метрика (12) также является плоской (см. (13)). В этом случае задачу определения собственных функций и собственных значений уравнения Дирака для движения фермионов в поле RNq можно решать, используя однозначные граничные условия из аналогичной задачи для движения фермионов в кулоновском поле электрона в плоском пространстве Минковского.

В случае квантовой геометрии Керра–Ньюмена мы сталкиваемся с другой ситуацией. При $r \rightarrow 0$ и $R_S = R_S^e$ метрика (3) остается неплоской и имеет следующий вид:

$$ds_{KNq}^2 = dt^2 - \cos^2 \theta dr^2 - a_e^2 \cos^2 \theta d\theta^2 - a_e^2 \sin^2 \theta d\varphi^2. \quad (20)$$

В [11, 12] показано, что в этом случае уравнение Дирака имеет два квадратично интегрируемых решения, что делает невозможной постановку задачи о собственных значениях и собственных функциях для фермионов, движущихся в классическом или квантовом пространстве-времени KN.

Для определенности квантовомеханической задачи необходимо проводить самосопряженное расширение гамильтониана, что, как правило, приводит к установлению нового граничного условия в окрестности $r = 0$ (см., например, [13, 14]).

В результате анализа таблицы мы пришли к выводу, что в настоящее время предпочтительнее использовать квантовую модель электрона с модифицированной геометрией Райсснера – Нордстрема.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы предложили две квантовые модели электрона с нулевыми собственными энергиями. Модели предложены на основе квантовых геометрий Райсснера – Нордстрема [4] и Керра – Ньюмена [5]. Важным для регуляризации ключевых величин ОТО является выбор $R_S^e = \pi e^2 / 8m_e c^2 \simeq 1.11 \cdot 10^{-13}$ см. При этом $k_{UV}^e = \hbar c / R_S^e \approx 178$ МэВ. Предложенные модели позволяют решить давнюю проблему линейной расходимости собственной энергии заряженной частицы в классической электродинамике. В рассмотренных моделях гравитация компенсирует электромагнитную составляющую в выражениях для полной энергии электрона.

Можно предположить, что при появлении более совершенных квантовых теорий гравитации аналогичным образом будет решена проблема бесконечной собственной энергии заряженных фермионов в квантовой теории поля.

Примечательно, что при использовании модели электрона с квантовой геометрией Райсснера – Нордстрема можно кроме нулевой собственной энергии все остальные эффекты классической и квантовой электродинамики вычислять в стандартной парадигме элементарной частицы с точечными массой m_e и электрическим зарядом $e < 0$. Это связано с чрезвычайно малыми значениями коэффициентов

$Gm_e/c^2 \simeq 0.7 \cdot 10^{-55}$ см и $Ge^2/c^4 \simeq 1.9 \cdot 10^{-68}$ см² в формуле (16) для массовой функции $m_{RNq}^e(r)$. Учет столь малых коэффициентов в численных расчетах и сравнение с экспериментами чрезвычайно высокой точности — дело отдаленного будущего. Исключением является вычисление полной энергии заряженной элементарной частицы и ее собственной энергии.

Пренебрежение коэффициентами Gm_e/c^2 и Ge^2/c^4 превращает квантовую геометрию Райсснера – Нордстрема в плоское пространство-время Минковского. В этом случае мы возвращаемся в область применимости классической и квантовой электродинамики заряженных лептонов Стандартной модели.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, проект «Физика частиц и космология».

Благодарности. Авторы благодарны С. Ю. Седову за многочисленные обсуждения некоторых разделов нашей статьи, а также А. Л. Новоселовой за существенную техническую помощь в подготовке статьи.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ЭНЕРГИЯ ЗАРЯЖЕННОЙ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ С КВАНТОВЫМ ЯДРОМ [5]

Для квантовой метрики KN полная энергия, определяемая интегралом по объему от плотности энергии $T_0^0 \equiv \rho_\varepsilon(r, \theta)$ равна

$$\begin{aligned}
 E &= \int T_0^0 \sqrt{-g} dV = \frac{1}{4G} \int_0^\infty dr \int_{-1}^1 d\mu (r^2 + a^2 \mu^2) G_0^0(r, \mu) = \\
 &= \frac{1}{4G} \int_0^\infty dr \int_{-1}^1 d\mu \left[2 \frac{r^4 + (\rho^2 - r^2)^2 + a^2 (2r^2 - \rho^2)}{\rho^4} m'_{KNq} - \frac{ra^2 (1 - \mu^2)}{\rho^2} m''_{KNq} \right] = \\
 &= \frac{1}{4G} \int_0^\infty dr \left\{ \left[8 - 4 \frac{r}{a} \operatorname{arctg} \frac{a}{r} \right] \left[GM \frac{2}{\pi} \frac{\sin(r/R_S)}{r} + \frac{CQ^2}{2r^2} \left(1 - \cos\left(\frac{r}{R_S}\right) \right) - \frac{CQ^2}{2rR_S} \sin\left(\frac{r}{R_S}\right) \right] + \right. \\
 &+ \left[2r - 2 \frac{r^2}{a} \operatorname{arctg} \frac{a}{r} - 2a \operatorname{arctg} \frac{a}{r} \right] \left[GM \frac{2}{\pi} \frac{\cos(r/R_S)}{r/R_S} \frac{1}{R_S^2} - GM \frac{2}{\pi} \frac{\sin(r/R_S)}{(r/R_S)^2} \frac{1}{R_S^2} - \frac{CQ^2}{r^3} \left(1 - \cos\left(\frac{r}{R_S}\right) \right) + \right. \\
 &+ \left. \left. \frac{CQ^2}{r^2 R_S} \sin\left(\frac{r}{R_S}\right) - \frac{CQ^2}{2rR_S^2} \cos\left(\frac{r}{R_S}\right) \right] \right\} = M + \frac{1}{2} \frac{|J|}{R_S} - \frac{\pi}{16} \frac{Q^2 |J|}{M} \frac{1}{R_S^2} = M + \frac{1}{2} \frac{|J|}{\hbar} k_{UV} - \frac{\pi}{16} \frac{Q^2 |J|}{M} \frac{k_{UV}^2}{\hbar^2}.
 \end{aligned}$$

Для метрик К, КN

$$\sqrt{-g} = \rho^2 \sin \theta; \quad \rho^2 = r^2 + a^2 \mu^2, \quad \mu = \cos \theta;$$

$$m'_{KNq} \equiv \frac{dm_{KNq}}{dr}, \quad m''_{KNq} \equiv \frac{d^2 m_{KNq}}{dr^2},$$

$$m_{KNq} = GM \frac{2}{\pi} \text{Si} \left(\frac{r}{R_S} \right) - \frac{GQ^2}{2r} \left(1 - \cos \left(\frac{r}{R_S} \right) \right).$$

При

$$R_S = R_S^{reg} = \frac{\pi}{8} \frac{Q^2}{Mc^2}$$

полная энергия квантового заряженного вращающегося коллапсара равна $E = Mc^2$. Величины ОТО, такие как массовая функция $m(r)$, тензор Риччи $R_{\mu\nu}(r, \theta)$, скаляр Кретчмана $K(r, \theta)$ и т.д. становятся регулярными.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. V. Costa, D. M. Gitman, and A. E. Shabad, Phys. Scripta **90**, 074012 (2015).
2. Т. К. Адорно, Д. М. Гитман, А. Е. Шабад, А. А. Шишмарев, Изв. вузов, Физика, №11 (2016).
3. K. Casadio, Int. J. Mod. Phys. D **31**, 2250128 (2022); arXiv: 2103.00183v4 (gr-qc).
4. R. Casadio, A. Giusti, and J. Ovalle, Phys. Rev. D **105**, 124026 (2022); arXiv: 2203.03252v2 (gr-qc).
5. V. P. Neznamov, S. Yu. Sedov, and V. E. Shemarulin, Int. J. Mod. Phys. A **39**, 2450012 (2024).
6. M. Cürses and F. Cürsey, J. Math. Phys. **16**, 2385 (1975).
7. C. A. López, Phys. Rev. D **30**, 313 (1984).
8. В. П. Незнамов, И. И. Сафронов, В. Е. Шемарулин, Доклады Российской академии наук, Физика, технические науки **511**, 16 (2023).
9. B. Carter, Phys. Rev. **174**, 1559 (1968).
10. C. L. Pekeris and K. Frankowski, Phys. Rev. A **36**, 5118 (1987).
11. C. L. Pekeris, Phys. Rev. A **35**, 14 (1987).
12. C. L. Pekeris and K. Frankowski, Phys. Rev. A **39**, 518 (1989).
13. D. M. Gitman, I. V. Tyutin, and B. L. Voronov, *Self-Adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Progr. Math. Phys. **62**, Birkhauser, New York (2012).
14. A. E. Shabad, J. Phys. A **38**, 7419 (2005); arXiv:hep-th/0502139 (2005).

КАНАЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОНОВ В МАГНИТНОМ ПЛОСКОМ ВОЛНОВОДЕ

С. В. Кожевников ^{a*}, Ю. Н. Хайдуков ^{b,c,d}

^a Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка,
Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

^b Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

^c Max Planck Institut für Festkörperforschung
D-70569, Stuttgart, Germany

^d Max Planck Society Outstation at FRM-II
D-85747, Garching, Germany

Поступила в редакцию 8 мая 2024 г.,
после переработки 3 июня 2024 г.
Принята к публикации 10 июня 2024 г.

Трехслойный волновод преобразует обычный коллимированный пучок нейтронов в узкий расходящийся микропучок. Исследуется распространение нейтронов в волноводе с внешними магнитными слоями. Регистрируется интенсивность нейтронного микропучка, выходящего из торца среднего немагнитного слоя. Экспериментально определяется длина каналирования нейтронов в зависимости от знака поляризации падающего пучка.

DOI: 10.31857/S0044451025010067

1. ВВЕДЕНИЕ

Нейтронное рассеяние является мощным неразрушающим методом исследования магнитных структур, полимеров и биологических объектов благодаря особым свойствам нейтронов: наличию собственного магнитного момента, высокой проникающей способности и изотопной чувствительности. Свойства нейтронного и рентгеновского излучения сильно различаются, поэтому их часто используют в качестве взаимодополняющих методов. Например, поляризованные пучки нейтронов являются уникальным инструментом изучения магнитных материалов в объеме вещества, что недоступно для рентгеновского излучения из-за его низкой проникающей способности.

Ширина нейтронного пучка определяет пространственное разрешение и масштаб исследуемых

объектов. Обычная ширина пучка в нейтронном эксперименте составляет величину от 0.1 до 10 мм. Для изучения локальных микроструктур в масштабе десятков микрометров необходимо иметь очень узкие пучки нейтронов. С этой целью разрабатываются различные фокусирующие устройства (параболические зеркальные нейтронноводы, преломляющие линзы, изогнутые кристаллы-монокроматоры и др.) [1], которые способны сжать нейтронный пучок до 50 мкм. Меньшей ширины пучка не удастся достичь из-за ограничений, которые определяются физическими свойствами используемых материалов и технологией их обработки. Другой проблемой этих устройств является то, что они не могут эффективно выделить «чистый» микропучок. Например, параболические зеркальные нейтронноводы формируют пучок, сильно структурированный в пространстве, преломляющие линзы фокусируют лишь 20–30% начального пучка, а капиллярные линзы имеют большой фон. В работе [2] рассчитан профиль микропучка после диафрагмы из лезвий поглощающего нейтроны кристалла $Gd_2Ga_5O_{12}$

* E-mail: kozhevn@nf.jinr.ru

(или GGG). Получено, что микропучок имеет центральную часть размером около 100 мкм и крылья, ширина которых меняется от 10 до 20 мкм. Там же продемонстрирован способ получения микропучка при полном зеркальном отражении нейтронов от кремниевой подложки. Метод обладает несомненными преимуществами: высокой интенсивностью порядка 1000 нейтр./с, низким фоном около 2 нейтр./мин и возможностью использовать времяпролетную технику. Но практически достижимая ширина микропучка при длине волны нейтронов 4.0 Å и ширине кремниевой подложки 8 мм все еще составляет величину около 30 мкм.

Рекордсменами по минимальной ширине нейтронного микропучка являются трехслойные волноводы (рис. 1). Принцип их действия состоит в следующем. Коллимированный пучок нейтронов с угловой расходимостью $\delta\alpha_i$ падает в вакууме (среда 0) на поверхность волновода под малым углом скольжения α_i . Потом нейтроны туннельным образом проходят через тонкий верхний слой (среда 1) толщиной $a = 5\text{--}20$ нм и попадают в средний слой (среда 2) шириной $d = 100\text{--}200$ нм. Затем нейтроны практически полностью отражаются от сравнительно толстого нижнего слоя (среда 3), напыленного на толстую подложку (например, стекло). Далее часть нейтронов туннелирует через верхний слой и выходит из волновода в направлении зеркально отраженного пучка $\alpha_f = \alpha_i$. Другая часть нейтронов отражается от верхнего тонкого слоя 1 и возвращается обратно в средний слой 2. В результате многократного отражения нейтроны распространяются вдоль среднего слоя как в канале и выходят из его торца в виде микропучка с расходимостью $\delta\alpha_f$. Основной вклад в угловую расходимость микропучка $\delta\alpha_f$ вносит дифракция Фраунгофера $\delta\alpha_F$ на узкой щели шириной d , которой является волноводный канал: $\delta\alpha_F \propto \lambda/d$. Здесь λ — длина волны нейтронов.

К настоящему времени слоистые нейтронные волноводы довольно хорошо изучены. В [3] из торца трехслойного волновода получен неполяризованный микропучок нейтронов, а в [4] — поляризованный. В [5–7] экспериментально определен вклад дифракции Фраунгофера $\delta\alpha_F$ в угловую расходимость микропучка нейтронов. В [2, 8] поляризованный микропучок нейтронов из волновода использован для пространственного сканирования микропроволочки диаметром 190 мкм из аморфного магнитного материала. При расстоянии 1 мм от выхода волновода, длине волны нейтронов 4.0 Å, ширине волноводного канала 150 нм и расходимости микропучка 0.15° расчетная ширина микропучка на месте образца со-

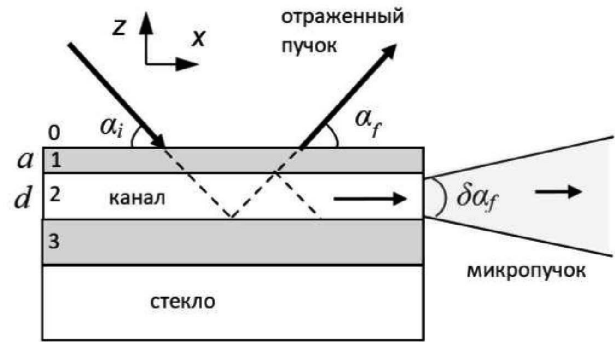


Рис. 1. Принцип действия плоского нейтронного волновода

ставила 2.6 мкм. При интенсивности микропучка порядка 1 нейтр./с статистически обеспеченные данные были получены за время около 10 ч. Экспериментальная установка подробно описана в [2]. Преимуществами плоских волноводов являются рекордно малая ширина нейтронного микропучка и сравнительно простой способ отделения микропучка от фона. Их очевидными недостатками являются низкая интенсивность и достаточно большая расходимость микропучка. Но ввод в эксплуатацию более мощных нейтронных источников (SNS, ESS, ПИК, ИБР-3) может сделать использование слоистых волноводов более доступным.

В плоских волноводах одновременно наблюдается два явления — резонансное усиление нейтронных стоячих волн и каналирование нейтронов. Теория нейтронных резонансов в слоистых волноводах описана в [9]. Введем обозначения

$$k_{0z} = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \alpha_i,$$

$$k_{1z} = \sqrt{k_{0z}^2 - \rho_1}, \quad k_{2z} = \sqrt{k_{0z}^2 - \rho_2},$$

$$k_{0x} = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \alpha_i.$$

Здесь ρ_1 — плотность длины рассеяния (ПДР) нейтронов для верхнего слоя 1, ρ_2 — ПДР для волноводного слоя 2. Волновая функция нейтронов имеет общий вид

$$\Psi(k_{0z}, z) = A \exp(ik_{0z}z),$$

где A — амплитуда волновой функции. Тогда получим, что $|\Psi|^2 = |A|^2$. Внутри среднего слоя волновая функция имеет вид

$$\Psi(z) = A [\exp(-ik_{2z}z) + R_{23} \exp(ik_{2z}z)],$$

где R_{23} — амплитуда отражения волновой функции нейтронов от нижнего слоя 3. Амплитуду A определяют из самосогласованного уравнения для волновой функции нейтронов в слое 2, если начало координат $z = 0$ совместить с границей раздела слоев 1 и 2:

$$A = T_{02} \exp(ik_{2z}d) + R_{21}R_{23} \exp(ik_{2z}2d)A, \quad (1)$$

где T_{02} — амплитуда пропускания волновой функции нейтронов из вакуума 0 в среду 2, R_{21} — амплитуда отражения волновой функции нейтронов в среде 2 от слоя 1. Из самосогласованного уравнения (1) находим

$$|\Psi|^2 = |A|^2 = \frac{|T_{02}|}{|1 - R_{21}R_{23} \exp(2ik_{2z}d)|}. \quad (2)$$

Величина $|A|^2$ в уравнении (2) имеет резонансные максимумы при периодических условиях для фазы волновой функции нейтронов:

$$\Phi(k_{0z}) = 2k_{2z}d + \arg(R_{21}) + \arg(R_{23}) = 2\pi n, \quad (3)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ — порядок резонанса. Если длина волны нейтронов фиксирована, то угол скольжения начального пучка имеет резонансы по углу α_{in} . Если используется метод по времени пролета, то угол скольжения начального пучка фиксирован, а конечный спектр нейтронов имеет резонансы по длине волны λ_n . В [10] на времяпролетном рефлектометре было экспериментально показано, что спектральная ширина нейтронных резонансов увеличивается при увеличении расходимости падающего пучка $\delta\alpha_i$.

Параметр $|A|^2$ является коэффициентом усиления нейтронной плотности внутри среднего слоя, и для различных резонаторов он может достигать величин порядка 10^1 – 10^3 . Слоистые резонаторы используются для усиления слабого взаимодействия нейтронов с веществом [11]. Нейтронные резонансы проявляются как слабые минимумы на коэффициентах зеркального отражения нейтронов и как соответствующие им резонансно усиленные максимумы вторичного характеристического излучения или специфического нейтронного рассеяния. При взаимодействии нейтронов с некоторыми элементами и изотопами в результате ядерных реакций возникает вторичное характеристическое излучение, например, гамма-кванты [12] и альфа-частицы [13]. В [14–17] подробно описаны экспериментальная установка и метод нейтронной рефлектометрии с регистрацией вторичного излучения.

В качестве специфического нейтронного рассеяния в резонаторе могут выступать нейтроны, испытывавшие переворот спина при взаимодействии с

магнитно-неколлинеарными слоистыми структурами [18–20], некогерентно рассеянные при взаимодействии с водородом [21], незеркально рассеянные на межслойных шероховатостях [22, 23] и доменной структуре [24, 25]. Высокая чувствительность положения нейтронных резонансов по энергии к изменению величины ПДР резонансного слоя была использована для определения малого изменения концентрации водорода в резонаторе [26, 27]. Такие резонаторы могут применяться как датчики в накопителях водорода.

Еще одним видом специфического нейтронного рассеяния является каналирование нейтронов. Нейтронный пучок, который распространяется вдоль среднего слоя, может выходить через поверхность волновода в виде коллимированного пучка обычной ширины или из торца канала в виде узкого расходящегося микропучка (рис. 1). Интенсивности нейтронов обоих пучков имеют резонансные максимумы по энергии. В [28] предложена идея использовать плоские нейтронные волноводы для определения слабой намагнитченности пленок величиной порядка 10^2 Гс. В [29, 30] эта идея была реализована экспериментально. В трехслойном волноводе внешние слои были немагнитными, а исследуемые ферромагнитные пленки TbCo_5 [29] и TbCo_{11} [30] выполняли роль среднего волноводного слоя. Величина намагнитченности определяется напрямую по разнице положений резонансов порядка $n = 0$ для поляризации падающего пучка «+» и «–». При этом регистрация микропучка позволяет эффективно отделить полезный сигнал от фона, источником которого являются зеркально отраженный, преломленный и прошедший мимо образца пучки. В настоящей работе рассмотрен волновод, в котором внешние слои являются магнитными, а средний слой — немагнитным (рис. 2). В таких волноводах коэффициент усиления нейтронной плотности внутри волноводного канала зависит от проекции спина нейтронов «+» или «–» на направление вектора намагнитченности. В [31] предложена идея управлять цепной реакцией деления урана внутри немагнитного волноводного слоя с помощью перемагничивания внешних слоев приложенным магнитным полем. При этом должен меняться параметр x_e экспоненциального затухания нейтронной плотности, который называется длиной каналирования.

В [32] было теоретически показано, что при распространении нейтронов вдоль волноводного канала нейтронное волновое поле затухает как $\exp(-x/x_e)$, где x — расстояние под неосвещенной поверхностью

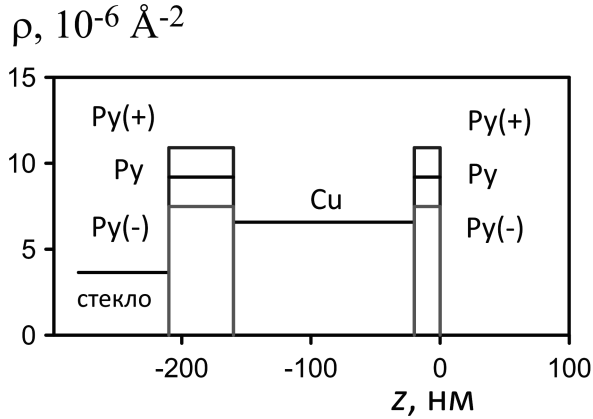


Рис. 2. ПДР волновода с магнитными внешними слоями в зависимости от координаты z в направлении перпендикулярно слоям. Обозначение для пермаллоя $\text{Py}(+)$ отвечает поляризации пучка нейтронов «+» и намагниченности пленки 7.2 кГс, $\text{Py}(-)$ — поляризации «-» и намагниченности пленки 7.2 кГс, а Py — неполяризованному пучку и размагниченному образцу

волновода. Было получено выражение для длины каналирования нейтронов:

$$x_e = \frac{k_x d}{k_{2z} |\ln |R_{21} R_{23}||}. \quad (4)$$

Если нижний слой достаточно толстый, то можно положить $R_{23} = 1$. Если амплитуда отражения нейтронов от верхнего слоя близка к единице, $R_{21} \approx 1$, то коэффициент прохождения нейтронов через верхний слой

$$T = |T_{20}| = 1 - |R_{21}|$$

является малым параметром, $T \ll 1$. Тогда можно записать приближенное выражение

$$|\ln |R_{21} R_{23}|| \approx |\ln (1 - T)| \approx T.$$

В этом случае получим упрощенное выражение для длины каналирования нейтронов:

$$x_e \approx \frac{k_x d}{k_{2z} T}. \quad (5)$$

Длину каналирования нейтронов можно определить экспериментально. На поверхность волновода ближе к выходному краю наносится полоска из поглощающего нейтроны материала, под которым образуется неосвещенная нейтронами область длиной x . Затем с помощью поглотителя изменяется длина неосвещенной области x и измеряется интенсивность микропучка из торца волновода $I(x)$. Для нормировки

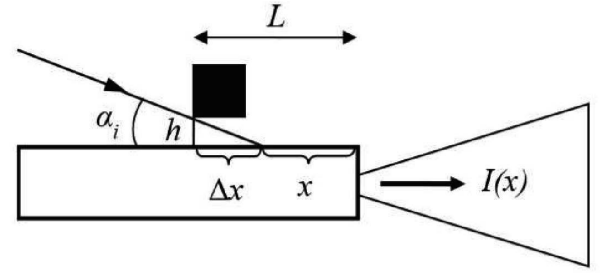


Рис. 3. Схема эксперимента по определению длины каналирования нейтронов с помощью скользящего бруска поглотителя

регистрируется интенсивность микропучка без поглотителя $I(x=0)$. Из теории каналирования [32] следует, что интенсивность микропучка нейтронов из торца волноводного канала экспоненциально затухает с ростом длины неосвещенной поверхности волновода x :

$$I(x)/I(x=0) = \exp(-x/x_e). \quad (6)$$

Из экспериментальной зависимости интенсивности микропучка (6) определяют длину каналирования нейтронов x_e , которая для различных волноводов может составлять величину 0.5–5.0 мм.

В качестве поглотителя нейтронов используют различные материалы: порошок Gd_2O_3 , пластины из Cd или бруски из боралоя (алюминия с карбидом бора). На рис. 3 показана экспериментальная схема со скользящим бруском из боралоя. Из-за кривизны бруска между ним и поверхностью волновода образуется воздушная прослойка высотой h порядка 10 мкм. Это приводит к тому, что часть поверхности волновода под поглотителем длиной Δx около 1.5 мм освещается падающим пучком нейтронов. В эксперименте регистрируется интенсивность микропучка нейтронов $I(L)$ в зависимости от расстояния L от выходного края волновода до переднего края поглотителя. Координата $L = \Delta x + x$ содержит в себе длину освещенной части Δx и неосвещенной части x поверхности волновода под поглотителем. С помощью преобразования координат $x = L - \Delta x$ определяется зависимость интенсивности микропучка от длины неосвещенной поверхности образца, $I(x)$. Для нормировки используется интенсивность микропучка нейтронов при полностью освещенной поверхностью волновода, $I(x=0)$. Величину Δx не нужно знать заранее, она получается автоматически в процессе обработки экспери-

ментальных данных. Более подробно процедура обработки данных будет описана в разд. 3.

В [33] представлена экспериментальная установка и обсуждаются различные способы измерения длины каналирования нейтронов. Сравниваются два поглотителя нейтронов — скользящий брусок из борала и порошок Gd_2O_3 . Преимущество порошка состоит в низком фоне в микропучке и более простой обработке экспериментальных данных, поскольку воздушный зазор между поверхностью и порошком отсутствует. Недостатки порошка: 1) при замене поглотителя с новой шириной x впустую тратится большое время; 2) его практически невозможно использовать при длине каналирования нейтронов менее 1 мм.

Преимущества скользящего бруска: 1) положение легко контролировать с хорошей точностью с помощью микрометрического винта; 2) на изменение положения бруска тратится гораздо меньше времени; 3) его можно использовать для определения малой величины длины каналирования менее 1 мм. Недостатками скользящего бруска являются более высокий фон в микропучке по сравнению с порошковым поглотителем и более сложная обработка данных.

В той же работе [33] экспериментально показано, что параметр экспоненциального затухания нейтронной плотности в геометрии отражения меньше, чем длина каналирования нейтронов в геометрии микропучка из торца канала.

Впервые явление каналирования нейтронов в трехслойных волноводах наблюдалось в геометрии отражения [34]. Впервые длина каналирования нейтронов в геометрии микропучка из торца волновода была экспериментально измерена в [35] с поглощающим порошком на поверхности. В [36] были проведены эксперименты по каналированию нейтронов с пластинкой Cd на поверхности образца. В [37] приведен обзор работ по исследованию и применению плоских нейтронных волноводов: расчеты показали, что длина каналирования нейтронов (5) зависит от порядка резонанса $n = 0, 1, 2 \dots$ и параметров волновода — толщины верхнего слоя a , ширины канала d и глубины потенциальной ямы ПДР $\Delta\rho = \rho_1 - \rho_2$. Получено, что

$$\ln x_e \propto a, \quad \ln x_e \propto d, \quad \ln x_e \propto \Delta\rho$$

для резонанса порядка $n = 0$ и

$$x_e \propto 1/(n+1)$$

для первых трех порядков резонансов $n = 0, 1, 2$. В экспериментах со скользящим бруском определена

длина каналирования нейтронов в зависимости от порядка резонанса и толщины верхнего слоя [38], от ширины волноводного канала [39] и от глубины потенциальной ямы для нескольких волноводов [40]. Полученные экспериментальные результаты подтвердили предсказания теории.

В настоящей работе экспериментально определяется длина каналирования нейтронов в волноводе с магнитными внешними слоями, в котором глубина потенциальной ямы изменяется в зависимости от знака поляризации падающего пучка нейтронов.

2. РАСЧЕТЫ

Расчеты были проведены для волновода $Pu(20 \text{ нм})/Cu(140 \text{ нм})/Pu(50 \text{ нм})//\text{стекло}$. Пермаллой (Pu) является магнитным сплавом $Fe(20.6 \text{ ат.}\%)Ni(79.4 \text{ ат.}\%)$ с узкой петлей гистерезиса. На рис. 2 показана ПДР волновода в зависимости от координаты z в направлении, перпендикулярном слоям. Здесь обозначения $Pu(+)$ и $Pu(-)$ соответствуют ПДР намагниченного до насыщения пермаллоя для нейтронов со спинами «+» и «-», а Pu отвечает ПДР для полностью размагниченного состояния пермаллоя. Можно видеть, что ПДР пермаллоя меняется в зависимости от знака спина нейтронов. Для расчетов намагниченность слоев пермаллоя равна 7.2 кГс. Длина волны нейтронов равна 4.26 Å. На рис. 4 приведена рассчитанная величина квадрата модуля волновой функции нейтронов $|\Psi|^2$ в зависимости от угла скольжения падающего пучка α_i и координаты z в направлении, перпендикулярном слоям. Рис. 4а соответствует поляризации падающего пучка «+», или UP, на рис. 4б показан расчет для неполяризованного падающего пучка, NM, а рис. 4в соответствует поляризации падающего пучка «-», или DO. Можно видеть резонансы порядков $n = 0, 1, 2 \dots$, наиболее интенсивные из которых находятся в области полного отражения ниже горизонтальной штриховой линии. Коэффициент усиления нейтронной плотности достигает 30 для поляризации UP и резонанса $n = 0$. Также можно заметить, что двумерные карты нейтронной плотности отличаются для различной поляризации пучка нейтронов. При уменьшении глубины потенциальной ямы волновода положение резонансов смещается в меньшие углы скольжения падающего пучка, расстояние между резонансами уменьшается, и величина максимумов резонансов также уменьшается.

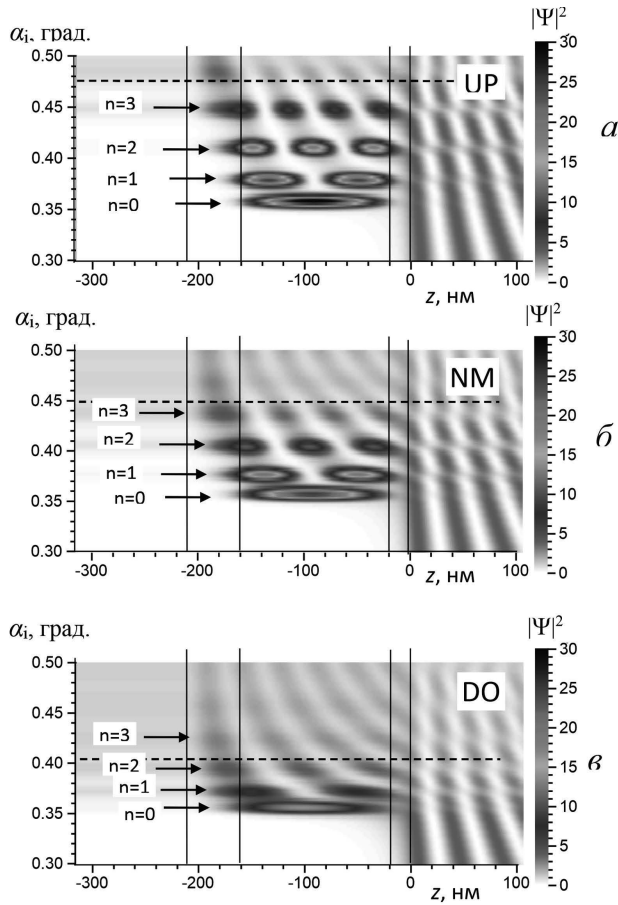


Рис. 4. Рассчитанный квадрат модуля волновой функции нейтронов в зависимости от угла скольжения падающего пучка и координаты в направлении перпендикулярно слоям при различной поляризации начального пучка: *a* — UP; *б* — неполяризованный пучок NM; *в* — DO. Длина волны нейтронов 4.26 Å

На рис. 5 *a* приведены коэффициенты зеркального отражения нейтронов для поляризации UP (тонкая линия), неполяризованного пучка NM (штриховая линия) и поляризации DO (толстая линия) в зависимости от угла скольжения падающего пучка. Видно, что область полного отражения смещается в сторону меньших углов скольжения для неполяризованного пучка NM и поляризации пучка DO по сравнению с поляризацией пучка UP. При этом в области полного отражения наблюдаются минимумы коэффициентов отражения, которые отвечают резонансам $n = 0, 1, 2 \dots$

На рис. 5 *б* показан квадрат модуля волновой функции нейтронов $|\Psi|^2$ (в относительных единицах), проинтегрированный по координате z внутри волноводного канала, в зависимости от угла сколь-

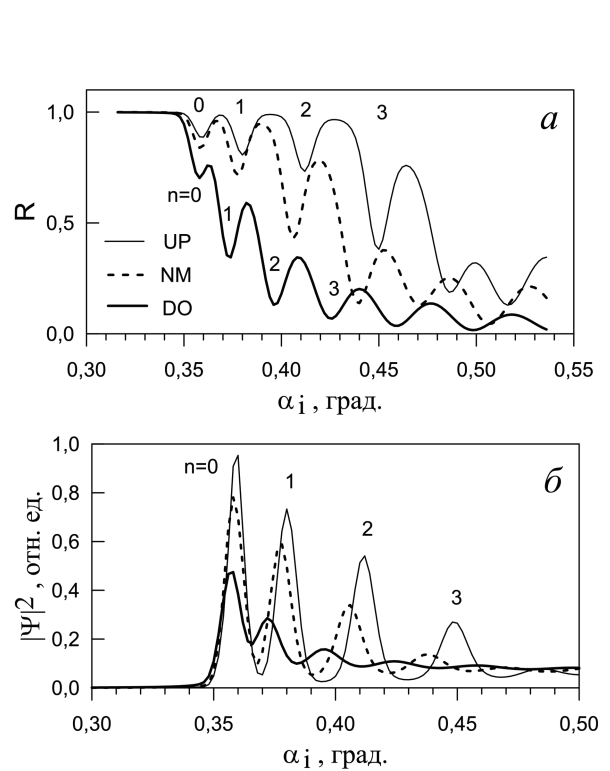


Рис. 5. Расчеты: *a* — коэффициент зеркального отражения нейтронов для поляризации UP (тонкая линия) и DO (штриховая линия) и для неполяризованного пучка NM (толстая линия) в зависимости от угла скольжения падающего пучка; *б* — квадрат модуля волновой функции нейтронов для поляризаций UP и DO и для неполяризованного пучка NM в зависимости от угла скольжения падающего пучка

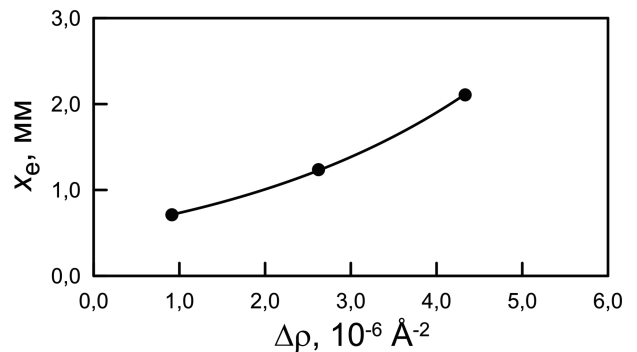


Рис. 6. Рассчитанная длина каналирования нейтронов как функция глубины потенциальной ямы волновода при различной поляризации падающего пучка

жения падающего пучка. Можно видеть максимумы, соответствующие резонансам $n = 0, 1, 2 \dots$. Если величину максимума резонанса порядка $n = 0$ для поляризации UP принять за 1.0, то максимум для неполяризованного пучка составляет 0.8, а для поляризации DO равен 0.4. Таким образом, квадрат модуля волновой функции нейтронов $|\Psi|^2$ зависит от глубины потенциальной ямы волновода.

На рис. 6 приведена длина каналирования нейтронов резонанса порядка $n = 0$ в зависимости от глубины потенциальной ямы волновода, рассчитанная для длины волны нейтронов 4.26 \AA по формуле (5). Точками показан расчет, а линией — подгонка экспоненциальной функцией. Видно, что длина каналирования нейтронов растет экспоненциально с ростом глубины потенциальной ямы волновода. Таким образом, предварительные расчеты предсказывают экспоненциальный рост квадрата модуля волновой функции нейтронов и длины каналирования нейтронов с увеличением глубины потенциальной ямы волновода.

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Эксперименты проведены на рефлектометре поляризованных нейтронов NREX (реактор FRM II, Garching, Germany) [41]. Плоскость образца располагается горизонтально, поэтому поглотитель в виде бруска из боралля лежит свободно на поверхности волновода. Размеры стеклянной подложки образца $\text{Ru}(20 \text{ нм})/\text{Cu}(140 \text{ нм})/\text{Ru}(50 \text{ нм})//\text{стекло}$ равны $30 \times 30 \times 5 \text{ мм}^3$. Размеры бруска поглотителя равны $1 \times 1 \times 38 \text{ мм}^3$. Длина волны нейтронов равна 4.26 \AA . В режиме поляризованного пучка разрешение по длине волны равно 1.5% , угловая расходимость падающего пучка 0.006° . Угловое разрешение ^3He -газового двумерного позиционно-чувствительного детектора равно 0.072° . Поляризующая эффективность поляризатора в виде одностороннего суперзеркала равна 97% . Поляризатор используется в геометрии пропускания. Внешнее магнитное поле напряженностью 1.0 кЭ приложено параллельно плоскости образца для намагничивания пленки до насыщения. Ширина первой диафрагмы равна 0.25 мм . Расстояние от первой диафрагмы до образца составляло 2200 мм , а от образца до детектора — 2400 мм . Пространственное разрешение детектора равно 3.0 мм . Перед образцом на расстоянии 200 мм располагалась вторая диафрагма шириной 0.7 мм , назначение которой состояло в уменьшении фона.

Размагниченное состояние образца достигалось во внешнем магнитном поле $+3 \text{ Э}$, приложенном вдоль плоскости пленки. Это значение поля было найдено из петли гистерезиса, полученной с помощью измерения степени поляризации зеркально отраженного пучка. При определении длины каналирования нейтронов в размагниченном волноводе использовался режим неполяризованного пучка, для чего поляризатор убирался из пучка. Ширина первой диафрагмы была равна 0.35 мм . Разрешение по длине волны нейтронов составляло 2.0% , угловая расходимость падающего пучка была равна 0.009° .

На рис. 7а приведены коэффициенты зеркального отражения нейтронов для поляризации «+» (светлые точки) и «-» (темные точки). Линиями показаны результаты подгонки (толщина слоев в нм, величина ядерной части ПДР в \AA^{-2} , намагниченность слоев в кГс):

$$\begin{aligned} & \text{RuO} (2.3 \text{ нм}, 7.67 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}) / \\ & / \text{Ru} (19.5 \text{ нм}, 8.83 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}, 7.0 \text{ кГс}) / \\ & / \text{Cu} (132.0 \text{ нм}, 6.58 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}) / \\ & / \text{Ru} (48.0 \text{ нм}, 8.56 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}, 7.2 \text{ кГс}) / / \\ & // \text{стекло} (2.63 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}). \end{aligned}$$

В результате подгонки определено, что намагниченность верхнего слоя пермаллоя равна 7.0 кГс , а намагниченность нижнего слоя равна 7.2 кГс . На рис. 7б показан коэффициент зеркального отражения неполяризованного пучка нейтронов от размагниченного образца. Видно, что подгонка с нулевой намагниченностью слоев пермаллоя хорошо описывает экспериментальные данные.

На рис. 8а приведена интенсивность микропучка нейтронов без поглотителя на поверхности в зависимости от угла скольжения падающего пучка для начальной поляризации «+» (светлые символы) и «-» (темные символы) при полностью освещенной поверхности волновода. Индексами $n = 0, 1, 2 \dots$ отмечены резонансы соответствующих порядков. Можно заметить, что максимум интенсивности микропучка в резонансе порядка $n = 0$ (за вычетом фона) для начальной поляризации «-» примерно в два раза ниже максимума интенсивности для поляризации «+». Резонансы более высоких порядков $n = 1, 2, 3$ хорошо видны для поляризации «+». Для поляризации «-» заметен небольшой пик резонанса $n = 1$, который значительно смещен в меньшие углы относительно резонанса $n = 1$ для поляризации «+». Интенсивность более высоких порядков

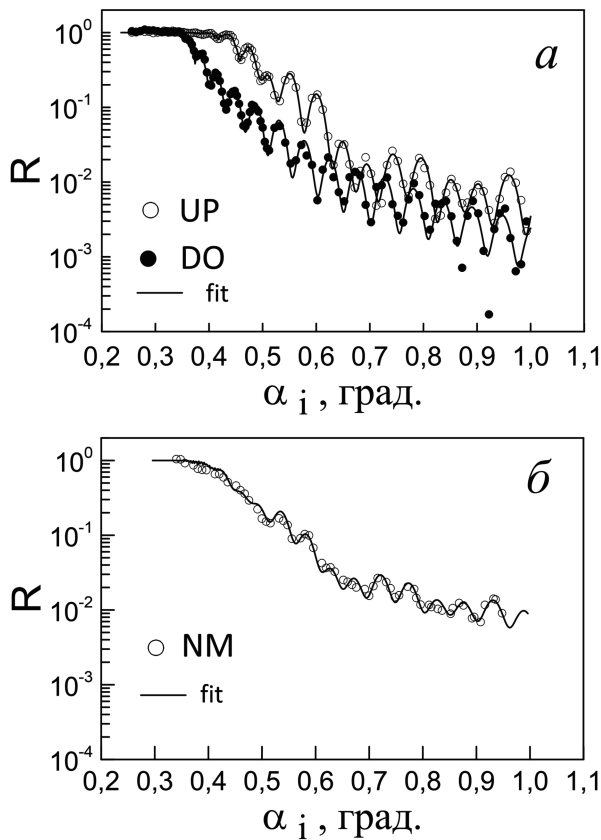


Рис. 7. Коэффициенты зеркального отражения нейтронов в зависимости от угла скольжения падающего пучка (точки — эксперимент, линии — подгонка): *a* — поляризованный пучок UP и DO; *б* — неполяризованный пучок NM

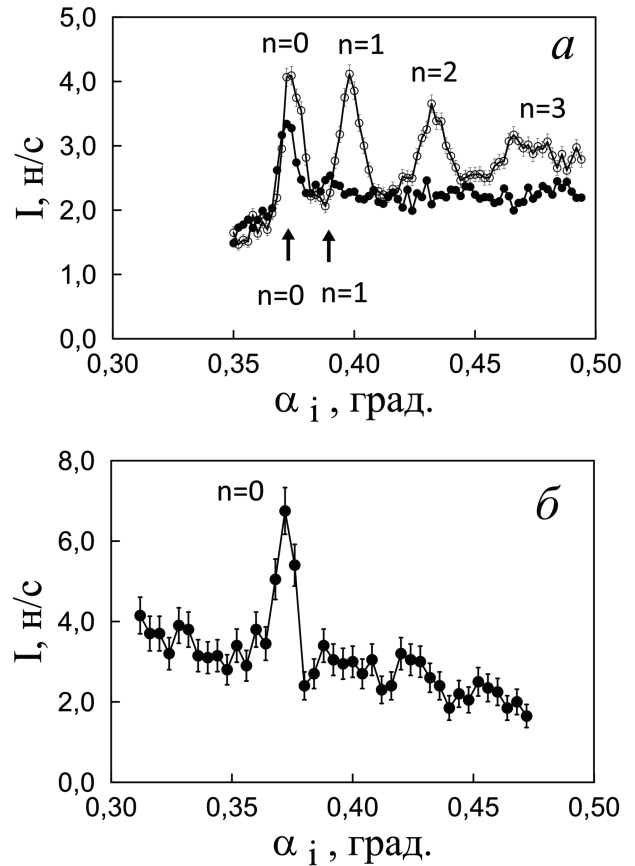


Рис. 8. Интенсивность микропучка нейтронов в зависимости от угла скольжения падающего пучка: *a* — поляризация падающего пучка UP (светлые символы) и DO (темные символы); *б* — неполяризованный пучок

резонансов для поляризации «—» мала, поэтому пики не видны.

На рис. 8 *б* показана интенсивность микропучка нейтронов без поглотителя на поверхности размагниченного образца в зависимости от угла скольжения падающего неполяризованного пучка нейтронов. Можно хорошо видеть пик нейтронного микропучка резонанса порядка $n = 0$. Для нормировки измеряется интенсивность микропучка $I(x = 0)$ с поглотителем на самом краю выходного торца волновода, когда поверхность волновода полностью освещается падающим пучком нейтронов. При этом основная часть зеркально отраженного пучка блокируется поглотителем, что приводит к уменьшению уровня фона в районе микропучка примерно в 2 раза. Эта точка отвечает положению поглотителя относительно выходного края волновода $L = 1$ мм.

На рис. 9 приведена интенсивность микропучка нейтронов в зависимости от угла скольжения пада-

ющего поляризованного пучка UP для положения бруска поглотителя относительно выходного края волновода 1.0, 1.5, 2.5, 3.5, 4.0 мм. Эти данные были получены и опубликованы в нашей работе [38]. Видно, что интенсивность микропучка уменьшается при движении бруска от края волновода.

Далее был исследован размагниченный образец. На рис. 10 показана интенсивность микропучка нейтронов в зависимости от угла скольжения падающего неполяризованного пучка нейтронов NM для положения бруска поглотителя относительно выходного края волновода 1.0, 2.3, 2.7 мм. Можно заметить, что интенсивность микропучка уменьшается с ростом расстояния от выходного края волновода до переднего края поглотителя.

На рис. 11 приведена интенсивность микропучка нейтронов в зависимости от угла скольжения падающего поляризованного пучка DO для положения бруска поглотителя относительно выходного края

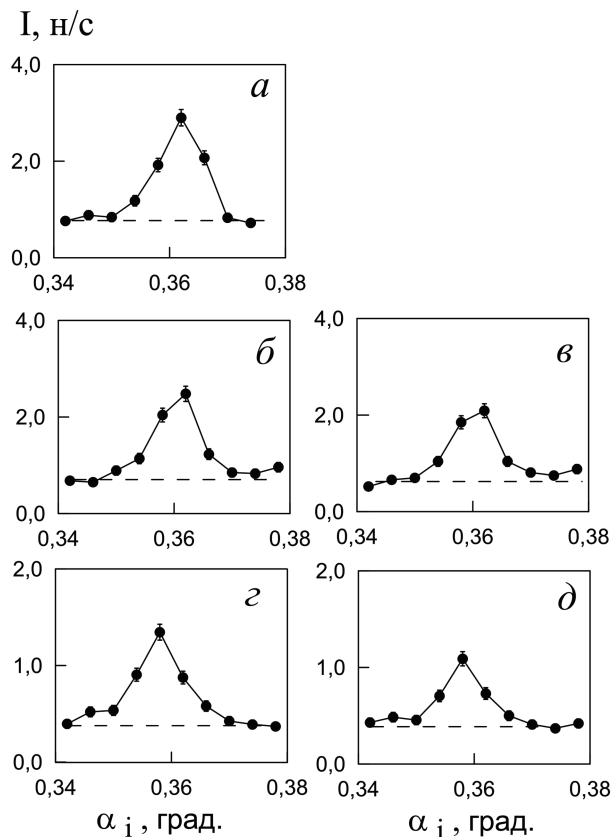


Рис. 9. Интенсивность микропучка для поляризации UP в зависимости от угла скольжения падающего пучка при различном расстоянии L между передним краем поглотителя на поверхности и выходным краем волновода: a — 1.0 мм; $б$ — 1.5 мм; $в$ — 2.5 мм; $г$ — 3.5 мм; $д$ — 4.0 мм. Штриховой линией показан уровень фона. Данные получены в работе [38]

волновода 1.0, 1.7, 1.9, 2.2, 2.4 мм. Можно видеть, что интенсивность микропучка уменьшается с ростом расстояния от выходного торца волновода до переднего края бруска.

На рис. 12 представлена нормированная интенсивность микропучка нейтронов $I(L)/I(x=0)$ в масштабе натурального логарифма в зависимости от расстояния L от выходного края волновода до переднего края бруска поглотителя (верхняя шкала и светлые символы) для падающего поляризованного пучка UP (a), неполяризованного пучка NM и размагниченного образца ($б$) и поляризованного пучка DO ($в$). Здесь учитывается условие $I(L=1 \text{ мм}) = I(x=0)$.

Можно видеть, что экспериментальные точки при расстоянии $L > 1$ мм укладываются на одну прямую, которая пересекает уровень 1.00 в точ-

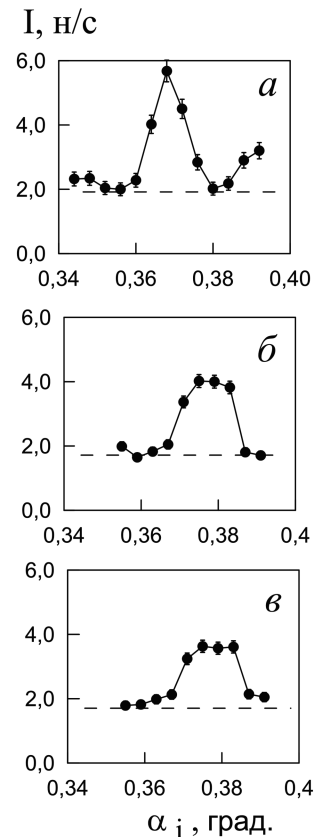


Рис. 10. Интенсивность микропучка в неполяризованной моде в зависимости от угла скольжения падающего пучка при различном расстоянии L между передним краем поглотителя на поверхности и выходным краем волновода: a — 1.0 мм; $б$ — 2.3 мм; $в$ — 2.7 мм. Штриховой линией показан уровень фона

ке L' . Вертикальные ошибки определяются статистическими ошибками интенсивности микропучка нейтронов. Обработка данных проводится следующим образом. Точка нормированной интенсивности при $L = 1$ мм помещается в начало координат $x = 0$ по оси абсцисс. Затем все оставшиеся точки на прямой по координате L (светлые символы) сдвигаются по оси абсцисс на одну величину L' так, чтобы прямая через все точки по координате $x = L - L'$ (темные символы и нижняя шкала) проходила через начало координат $x = 0$ по оси абсцисс. При этом величина сдвига L' зависит от точности начальной установки бруска поглотителя относительно выходного торца волновода и величины воздушного зазора между бруском и поверхностью волновода. Тогда прямая линия $\ln[I(x)/I(x=0)] = -x/x_e$ пересекает уровень 0.37 по оси ординат в точке x_e , которая и есть экспериментальная величина длины

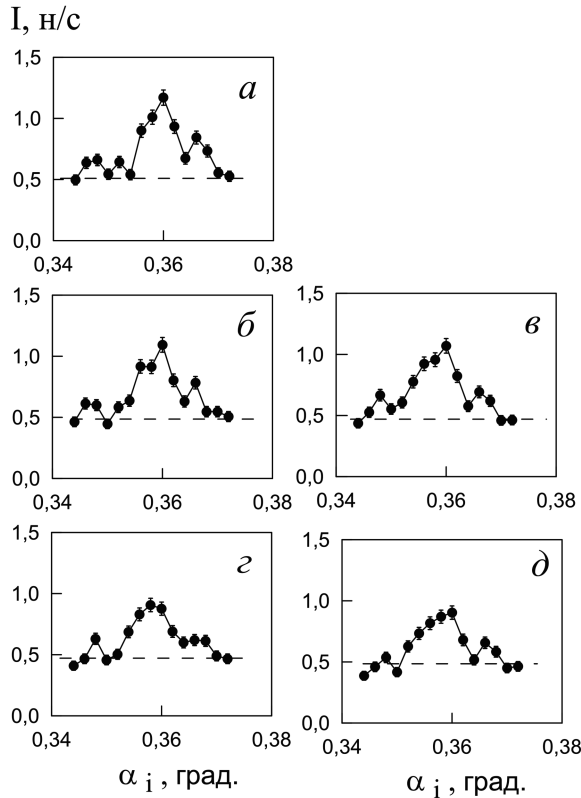


Рис. 11. Интенсивность микропучка для поляризации DO в зависимости от угла скольжения падающего пучка при различном расстоянии L между передним краем поглотителя на поверхности и выходным краем волновода: а — 1.0 мм; б — 1.7 мм; в — 1.9 мм; г — 2.2 мм; д — 2.4 мм. Штриховой линией показан уровень фона

каналирования нейтронов. Ошибка длины каналирования нейтронов определяется крайними траекториями, проходящими через экспериментальные точки с учетом статистической ошибки интенсивности микропучка. Можно заметить, что самая большая длина каналирования нейтронов наблюдается для поляризации начального пучка UP (рис. 12 а). Затем длина каналирования уменьшается для неполяризованного пучка NM и размагниченного образца (рис. 12 б). А самая маленькая длина каналирования наблюдается для поляризации DO (рис. 12 в).

Длина освещенной области поверхности под поглотителем Δx на рис. 3 равна величине L' , которая возникает в процессе обработки данных. Это момент, когда брусок только начинает частично закрывать поверхность волновода от падающего пучка. Тогда из равенства $\Delta x = L'$ можно для справки оценить величину воздушного зазора под бруском: $h \approx \alpha_i \Delta x$.

На рис. 13 приведена экспериментальная величина длины каналирования нейтронов в зависимости от глубины ПДР волновода $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$. Точки — эксперимент, линия — подгонка экспоненциальной функцией по методу наименьших квадратов. Можно видеть, что экспериментальные данные описываются экспоненциальной зависимостью. Это качественно подтверждает предварительные расчеты по теории каналирования. Количественное сравнение теории и эксперимента зависит от точности определения реальных параметров структуры (толщины оксидного слоя, толщин слоев, ПДР и намагниченности слоев), но небольшое отличие экспериментально полученных параметров структуры от номинальных значений не должно менять характер зависимости длины каналирования нейтронов от глубины потенциальной ямы волновода. Теория каналирования была экспериментально проверена нами ранее [35]. Рассчитанная длина каналирования нейтронов с уточненными параметрами волновода Fe/Cu/Fe//стекло была равна экспериментально полученной величине в пределах статистической ошибки.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотренный магнитный волновод Py/Cu/Py можно использовать в двух направлениях. Во-первых, как поляризатор для создания поляризованного микропучка нейтронов в экспериментах по исследованию магнитных микроструктур. Из соотношения интенсивностей микропучка поляризаций UP и DO для резонанса порядка $n = 0$ (рис. 8 а) следует, что поляризующая эффективность волновода составляет 0.3. В обзоре [37] подробно обсуждаются различные поляризующие и неполяризующие магнитные волноводы. Например, волновод Fe(20 нм)/Cu(140 нм)/Fe(50 нм)//стекло обладает поляризующей эффективностью 0.6 для резонанса $n = 0$. Поляризующая эффективность магнитного волновода Fe(20 нм)/Co(150 нм)/Fe(50 нм)//Si достигает 1.0. Магнитные волноводы обладают существенным недостатком. Из-за большой расходимости микропучка исследуемый образец должен располагаться на расстоянии порядка 1 мм от выхода волновода. В такой схеме эксперимента трудно разделить магнитное поле на волноводе и на образце. Наиболее практичной является комбинация рефлектометра поляризованных нейтронов и немагнитного волновода [42]. В этой конфигурации высокая поляризации микропучка создается

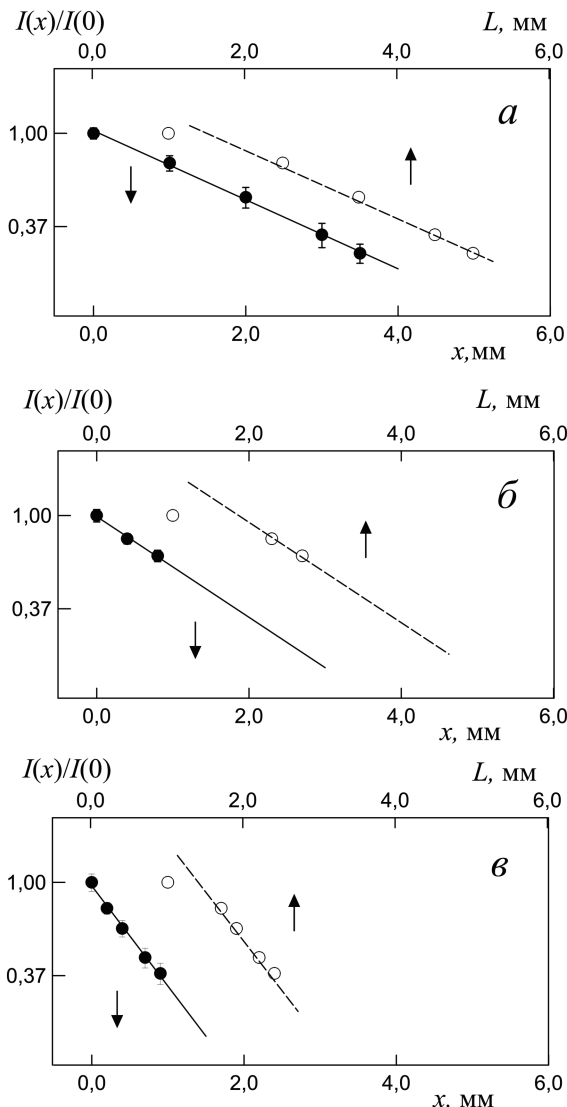


Рис. 12. Нормированная интенсивность микропучка в масштабе натурального логарифма как функция положения поглотителя L (светлые символы и верхняя шкала) и длины неосвещенной поверхности волновода x (темные символы и нижняя шкала) для различной поляризации падающего пучка: а — UP; б — NM; в — DO

обычным способом, а магнитное поле на образце никак не влияет на работу немагнитного волновода. Именно схема с немагнитным волноводом была использована в эксперименте с магнитной микропроволочкой [2, 8]. Таким образом, немагнитные волноводы имеют преимущество перед магнитными в экспериментах по изучению магнитных микроструктур с помощью поляризованного микропучка нейтронов.

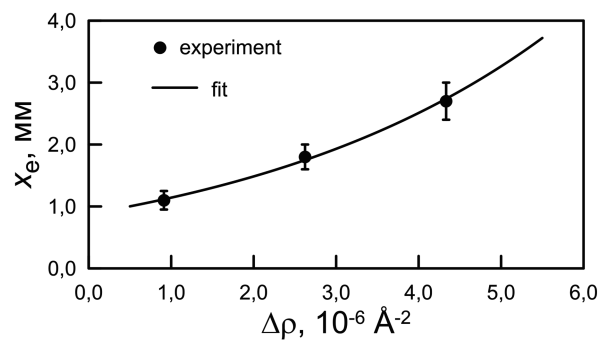


Рис. 13. Длина каналирования нейтронов в зависимости от глубины ПДР волновода при различной поляризации падающего пучка. Точки — эксперимент, линия — подгонка методом наименьших квадратов

Второй способ использования магнитных нейтронных волноводов — это контролируемая цепная реакция деления урана. В работе [31] высказана идея, что с помощью перемагничивания внешних магнитных слоев приложенным магнитным полем можно изменять нейтронную плотность в среднем немагнитном слое. Если поместить внутрь немагнитного слоя уран, то можно управлять реакцией деления урана с помощью внешнего магнитного поля. Подходящими кандидатами для этого метода являются магнитные волноводы $\text{Pu}/\text{Cu}/\text{Pu}$ и $\text{Fe}/\text{Cu}/\text{Fe}$. Предпочтительным является волновод $\text{Fe}/\text{Cu}/\text{Fe}$, у которого поляризующая эффективность в два раза выше. Но в настоящей работе мы исследовали волновод $\text{Pu}/\text{Cu}/\text{Pu}$. У него для поляризации падающего пучка ДО еще сохраняется неглубокая потенциальная яма ПДР, поэтому было возможно экспериментально измерить длину каналирования нейтронов для этой поляризации. Очевидно, что немагнитные волноводы не подходят для задачи управления цепной реакцией деления, так как они не реагируют на магнитное поле.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе был исследован нейтронный волновод $\text{Pu}/\text{Cu}/\text{Pu}$ /стекло с внешними магнитными слоями. Величина ПДР магнитного слоя зависит от знака поляризации падающего пучка нейтронов. Предварительные расчеты по теории резонансов в слоистых наноструктурах показали, что квадрат модуля волновой функции нейтронов внутри волновода растет с увеличением глубины потенциальной ямы ПДР. А расчеты по теории каналирования в

плоских волноводах предсказали экспоненциальный рост длины каналирования нейтронов с ростом глубины потенциальной ямы ПДР.

Экспериментально определена длина каналирования нейтронов для поляризации падающего пучка нейтронов UP и DO для намагниченного до насыщения образца и неполяризованного падающего пучка NM для полностью размагниченного образца. Получено, что длина каналирования нейтронов экспоненциально растет с ростом глубины ПДР. Таким образом, экспериментальные результаты подтверждают предсказания теории каналирования нейтронов в слоистых наноструктурах.

Благодарности. Авторы признательны Т. Келлеру (T. Keller) и Ф. Раду (F. Radu) за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Ott, *Focusing Optics for Neutrons*, in: *Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics*, Springer Series in Optical Sciences **137**, 113 (2008).
2. F. Ott, S. Kozhevnikov, A. Thiaville, J. Torrejon, and M. Vazquez, *Nucl. Instrum. and Meth. A* **788**, 29 (2015).
3. F. Pfeiffer, V. Leiner, P. Hoghoj, and I. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 055507 (2002).
4. S. V. Kozhevnikov, A. Ruhm, F. Ott, N. K. Pleshanov, and J. Major, *Physica B* **406**, 2463 (2011).
5. S. V. Kozhevnikov, V. K. Ignatovich, Yu. V. Nikitenko, F. Ott, and A. V. Petrenko, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 3 (2015).
6. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов, Ф. Раду, *ЖЭТФ* **154**, 698 (2018).
7. S. V. Kozhevnikov, V. D. Zhaketov, T. Keller, Yu. N. Khaydukov, F. Ott, and F. Radu, *Nucl. Instrum. and Meth. A* **915**, 54 (2019).
8. С. В. Кожевников, F. Ott, J. Torrejón, M. Vázquez, and A. Thiaville, *Физика Твердого Тела* **56**, 63 (2014).
9. F. Radu and V. K. Ignatovich, *Physica B* **292**, 160 (2000).
10. С. В. Кожевников, В. К. Игнатович, А. В. Петренко, Ф. Раду, *ЖЭТФ* **150**, 1094 (2016).
11. Ю. В. Никитенко, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **40**, 1682 (2009).
12. H. Zhang, P. D. Gallagher, S. K. Satija, R. M. Lindstrom, R. L. Paul, T. P. Russell, P. Lambooy, E. J. Kramer, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3044 (1994).
13. V. L. Aksenov, Yu. V. Nikitenko, F. Radu, Yu. M. Gledenov, and P. V. Sedyshev, *Physica B* **276–278**, 946 (2000).
14. В. Д. Жакетов, К. Храмо, А. В. Петренко, Ю. Н. Хайдуков, А. Чик, Ю. Н. Копач, Н. А. Гундорин, Ю. В. Никитенко, В. Л. Аксенов, *Поверхность* **6**, 10 (2021).
15. В. Д. Жакетов, А. В. Петренко, С. Н. Вдовичев, В. В. Травкин, А. Чик, Ю. Н. Копач, Ю. М. Гledenov, Э. Сансарбаяр, Н. А. Гундорин, Ю. В. Никитенко, В. Л. Аксенов, *Поверхность* **6**, 20 (2019).
16. Ю. В. Никитенко, А. В. Петренко, Н. А. Гундорин, Ю. М. Гledenov, В. Л. Аксенов, *Кристаллография* **60**, 518 (2015).
17. В. Л. Аксенов, В. Д. Жакетов, Ю. В. Никитенко, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **54**, 898 (2023).
18. В. Л. Аксенов, Ю. В. Никитенко, С. В. Кожевников, Ф. Раду, Р. Круис, Т. Реквелдт, *Поверхность* **8**, 10 (2000).
19. Yu. Khaydukov, A. M. Petrzhik, I. V. Borisenko, A. Kalabukhov, D. Winkler, T. Keller, G. A. Ovsyannikov, and B. Keimer, *Phys. Rev. B* **96**, 165414 (2017).
20. Yu. N. Khaydukov, D. Lenk, V. Zdravkov, R. Morari, T. Keller, A. S. Sidorenko, L. R. Tagirov, R. Tidecks, S. Horn, and B. Keimer, *Phys. Rev. B* **104**, 174445 (2021).
21. M. Wolff, A. Devishvili, J. A. Dura, F. A. Adlmann, B. Kitchen, G. K. Pálsson, H. Palonen, B. B. Maranville, Ch. F. Majkrzak, and B. P. Toperverg, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 016101 (2019).
22. S. V. Kozhevnikov, F. Ott, E. Kentzinger, and A. Paul, *Physica B* **397**, 68 (2007).
23. S. V. Kozhevnikov, F. Ott, A. Paul, and L. Rosta, *Eur. Phys. J. Special Topics* **167**, 87 (2009).
24. E. Kentzinger, U. Rucker, B. Toperverg, and T. Bruckel, *Physica B* **335**, 89 (2003).
25. F. Radu, A. Vorobiev, J. Major, H. Humblot, K. Westerholt, and H. Zabel, *Physica B* **335**, 63 (2003).
26. L. Guasco, Y. N. Khaydukov, S. Pütter, L. Silvi, M. Paulin, T. Keller, and B. Keimer, *Nature Commun.* **13**, 1486 (2022).

27. A. Perrichon, A. Devishvili, K. Komander, G. K. Pálsson, A. Vorobiev, R. Lavén, M. Karlsson, and M. Wolff, *Phys. Rev. B* **103**, 235423 (2021).
28. S. P. Pogossian, H. Le Gall, and A. Menelle, *J. Magn. Magn. Mater.* **152**, 305 (1996).
29. S. V. Kozhevnikov, Yu. N. Khaydukov, T. Keller, F. Ott, and F. Radu, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 38 (2016).
30. S. V. Kozhevnikov, V. D. Zhaketov, T. Keller, Yu. N. Khaydukov, F. Ott, Chen Luo, Kai Chen, and F. Radu, *Nucl. Instrum. and Meth. A* **927**, 87 (2019).
31. S. P. Pogossian, *J. Appl. Phys.* **102**, 104501 (2007).
32. V. K. Ignatovich and F. Radu, *Phys. Rev. B* **64**, 205408 (2001).
33. S. V. Kozhevnikov, T. Keller, Yu. N. Khaydukov, F. Ott, and F. Radu, *Nucl. Instrum. and Meth. A* **875**, 177 (2017).
34. V. L. Aksenov and Yu. V. Nikitenko, *Physica B* **297**, 101 (2001).
35. S. V. Kozhevnikov, V. K. Ignatovich, F. Ott, A. Rühm, and J. Major, *ЖЭТФ* **144**, 733 (2013).
36. Ю. В. Никитенко, В. В. Проглядо, В. Л. Аксенов, *Поверхность* **10**, 3 (2014).
37. С. В. Кожевников, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **50**, 284 (2019).
38. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов, Ю. Н. Хайдуков, Ф. Отт, Ф. Раду, *ЖЭТФ* **152**, 1192 (2017).
39. С. В. Кожевников, Т. Келлер, Ю. Н. Хайдуков, Ф. Отт, Ф. Раду, *ЖЭТФ* **155**, 590 (2019).
40. С. В. Кожевников, Ю. Н. Хайдуков, Ф. Отт, Ф. Раду, *ЖЭТФ* **153**, 712 (2018).
41. Yu. N. Khaydukov, O. Soltwedel, and T. Keller, *J. Large Scale Research Facilities A* **38**, 1-4 (2015).
42. S. V. Kozhevnikov, A. Rühm, and J. Major, *Crystallography Rep.* **56**, 1207 (2011).

ДИАЭЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В АЛЮМИНИИ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ НАНОСЕКУНДНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ДИАПАЗОНА

Г. В. Афонин^а, В. Ю. Железнов^б, Т. В. Малинский^б, С. И. Миколуцкий^б, В. Е. Роголин^б,
Ю. В. Хомич^б, Н. П. Кобелев^с, В. А. Хоник^{а*}

^а Воронежский государственный педагогический университет
394043, Воронеж, Россия

^б Институт электрофизики и электроэнергетики Российской академии наук
Санкт-Петербург

^с Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2024 г.,
после переработки 7 октября 2024 г.
Принята к публикации 8 октября 2024 г.

Показано, что воздействие на монокристаллический алюминий наносекундными импульсами ультрафиолетового лазера, вызывающее его поверхностное плавление, вызывает снижение всех резонансных частот спектра ультразвуковых колебаний образца. Модуль сдвига при этом уменьшается от 0.87% до 1.45% с ростом плотности падающего излучения от 1.1 Дж/см² до 5.3 Дж/см². Последующий нагрев до предплавильных температур вызывает восстановление модуля сдвига до исходного значения. Аргументируется гипотеза о том, что обнаруженный диаэластический эффект обусловлен межузельными атомами в гантельной конфигурации, формирующимися в поверхностном слое в результате плавления и сохраняющимися в этом слое в твердом состоянии за счет высокой скорости его охлаждения. Обсуждаются возможности других интерпретаций обнаруженного эффекта.

DOI: 10.31857/S0044451025010079

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерная обработка является одним из наиболее перспективных и востребованных способов модификации физических свойств материалов. Использование коротких лазерных импульсов позволяет получить высокие скорости нагрева и охлаждения приповерхностного слоя материала [1]. Оказывается, что поведение твердых тел при быстропротекающих процессах значительно изменяется. При этом возможно кардинальное изменение свойств, что позволяет получать материалы с новыми механическими, электрическими и оптическими свойствами. Импульсные лазеры являются удобным инструментом для экспериментальных исследований при создании новых материалов и изучения их свойств [2]. По-

лученные с их помощью результаты дают широкие возможности для углубленного понимания таких явлений, как фазовые переходы, рекристаллизация, образование структурных дефектов, аморфизация и др. [3, 4].

Отдельный интерес представляет использование лазерных импульсов длительностью порядка 10 нс с плотностью энергии в несколько Дж/см², приводящее к плавлению поверхностного слоя вещества за время действия импульса. Остывание этого слоя происходит в течение времени, сопоставимого с длительностью импульса [5, 6], а скорость охлаждения при использовании наносекундных импульсов может достигать 10¹⁰ К/с [7]. В случае чистого металла такая скорость охлаждения недостаточна для формирования некристаллического слоя (например, чистые ванадий и тантал стеклуются при скорости закалки приблизительно 10¹⁴ К/с [8]; есть основания считать, что стеклование моноатомных метал-

* E-mail: v.a.khonik@yandex.ru

лов реализуемо в принципе [9]), однако очевидно, что его дефектная структура претерпит существенные изменения. При этом можно ожидать изменения макроскопических упругих характеристик поскольку механические свойства кристаллов во многом определяются его дефектной структурой. Такая схема эксперимента была реализована в настоящей работе. Объектом изучения был выбран чистый монокристаллический алюминий, подвергнутый действию наносекундных импульсов ультрафиолетового лазера, что вызывало плавление поверхностного слоя и его последующее охлаждение (закалку) с высокой скоростью.

Исходная мотивация этой работы состояла в следующем. Известная межузельная теория Гранато аргументирует утверждение о том, что плавление металлов есть результат лавинообразной генерации межузельных атомов в гантельной конфигурации (межузельных гантелей), приводящей к сильному снижению модуля сдвига и дестабилизации кристаллической решетки [10, 11]. Применение этой теории для случая многокомпонентных металлических стекол дает очень хорошие результаты, позволяя количественно интерпретировать изменения их свойств при термообработке в твердом некристаллическом состоянии и проследить связь этих изменений со свойствами расплава и материнского кристалла [11]. Однако, информация о степени применимости этих представлений для случая чистых металлов весьма ограничена.

Во-первых, было показано, что монокристаллический алюминий в предплавильной области демонстрирует вполне измеримый диаэластический эффект - снижение модуля сдвига сверх стандартного чисто ангармонического уменьшения, что свидетельствует о значительном росте концентрации межузельных гантелей по мере приближения к температуре плавления [12]. Аналогичная ситуация имеет место и в поликристаллическом индии [13]. Во-вторых, было установлено, что наблюдаемый предплавильный нелинейный рост теплоемкости алюминия может быть также обусловлен интенсивной генерацией межузельных гантелей [14]. Наконец, в третьих, около 70% полной энтропии плавления алюминия (и, соответственно, теплоты плавления), наблюдаемой в эксперименте, может быть интерпретировано как результат генерации межузельных гантелей при температуре плавления [15].

Исходя из этой информации можно было предположить, что лазерное поверхностное плавление алю-

миния вызовет большой рост концентрации дефектов типа межузельных гантелей в расплаве, а последующее охлаждение с высокой скоростью «заморозит» их в твердом кристаллическом состоянии. Вмороженные межузельные гантели вызовут появление измеримого диаэластического эффекта, по величине которого можно судить о концентрации этих дефектов в расплаве. Впрочем, возможны и другие механизмы диаэластического эффекта, как обсуждается ниже.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследовались монокристаллы алюминия чистотой 99.996, выращенные модифицированным методом Бриджмена с ориентацией $\{100\}$ вдоль оси роста. Контроль ориентации был выполнен рентгеновским методом [12]. Из выращенного кристалла далее с помощью электроискровой резки готовились образцы в виде куба со стороной $a = (2.2 \pm 0.2)$ мм. При этом каждая грань куба была перпендикулярна направлению $[100]$. Образцы затем обрабатывались на шлифовальном станке абразивом зернистостью 1200 и отжигались путем нагрева до 923 К и последующего медленного охлаждения.

Обработка образцов осуществлялась сканирующим излучением лазера Optolette HR 2731 (OPOTEC Inc.), генерировавшего импульсы излучения с длиной волны 355 нм, длительностью приблизительно 10 нс при выходной энергии до 2 мДж и частоте следования импульсов 100 Гц. Калибровка лазера производилась при помощи измерителя энергии Nova II (Ophir Optronics Solutions Ltd.) с пирозлектрическим приемником PE50-SH-V2. Размер лазерного пятна в плоскости поверхности образца определялся по стандартной методике [16] путем измерения площади отпечатков, оставленных лазерными импульсами на поверхности эталона — алюминиевой пластины. Характерный диаметр лазерного пятна в настоящих экспериментах составлял 180 мкм. Обработка поверхности образца осуществлялась с помощью двухкоординатного стола, обеспечивающего перемещение образца по траектории «змейка» со скоростью 3 мм/с при расстоянии между строчками 25 мкм таким образом, чтобы соседние лазерные пятна перекрывали друг друга с коэффициентом перекрытия не менее 98 %. На каждый участок поверхности воздействовало 30 лазерных импульсов. Плотности энергии на поверхности обрабатываемых

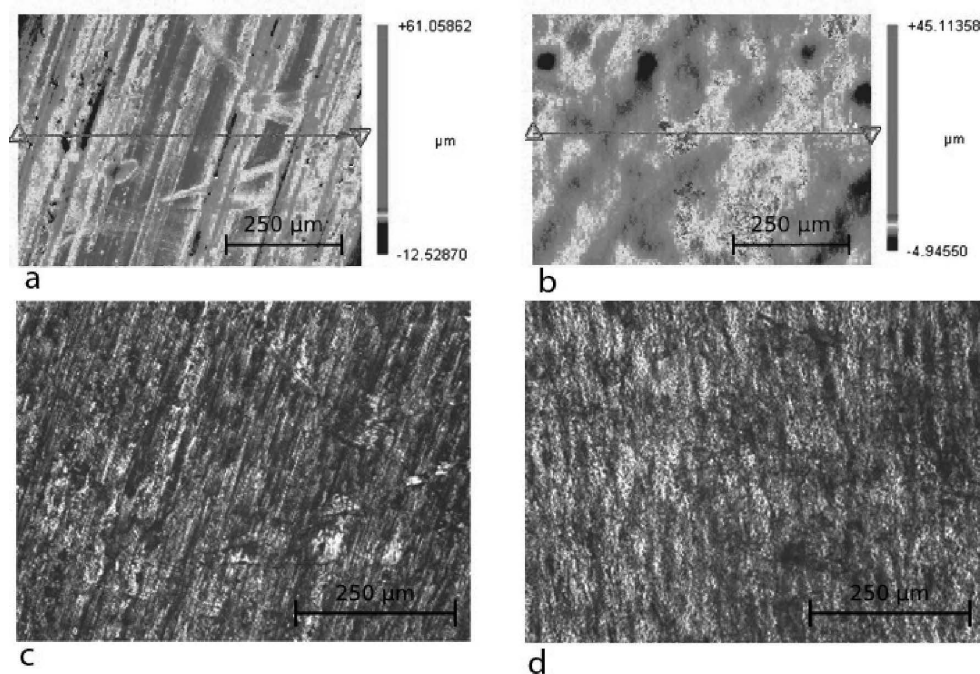


Рис. 1. (Цветной онлайн) 2D-профилограммы (*a, b*) и микрофотографии поверхности (*c, d*) (оптической профилометр Zygo NewView 7300) образца S5 в исходном состоянии (*a, c*) и после обработки 30-ю импульсами УФ лазера с плотностью энергии 5.3 Дж/см^2 (*b, d*)

образцов превышали порог абляции и составляли 1.1 Дж/см^2 , 2.4 Дж/см^2 и 5.3 Дж/см^2 . Превышение порога абляции наблюдалось визуально в виде сопутствующего плазменного факела и при анализе электронно-микроскопических снимков снимков поверхности облученных образцов. При этом последовательно обрабатывались все шесть граней каждого кубического образца. Поверхность образцов до и после лазерного воздействия исследовалась с помощью многолучевого оптического профилометра Zygo NewView 7300.

Облученные образцы затем исследовались методом резонансной ультразвуковой спектроскопии (РУС) на установке, аналогичной описанной в [17]. Возбуждение и регистрация ультразвуковых колебаний осуществлялось пьезоэлектрическими преобразователями, поджимавшими противоположные вершины кубического образца. Специальная система рычажного типа минимизировала осевое давление пьезопреобразователей на образец, обеспечивая измерение спектра его резонансных колебаний, близкого к естественному (т. е. определяемому только свойствами образца и его геометрией). Продвинутый аппаратно-программный комплекс обработки сигналов РУС позволял регистрировать резонанс-

ные частоты колебаний образцов с высокой точностью, до единиц ppm. Всего было исследовано пять образцов в исходном состоянии и после различной лазерной обработки. Результаты исследования проиллюстрированы ниже данными по трем из них. Отметим также, что время от облучения образцов до измерений РУС на них составляло несколько недель.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 в качестве примера показаны 2D-профилограммы (*a, b*) и микрофотографии поверхности (*c, d*) образца S5 в исходном состоянии (*a, c*) и после лазерного воздействия 30 импульсами лазера с плотностью энергии $W_p = 5.3 \text{ Дж/см}^2$ (*b, d*). Линейные особенности морфологии в исходном состоянии (*a, c*) соответствуют следам абразивной обработки в исходном состоянии. После лазерного воздействия эти особенности исчезают (*b, d*) и на поверхности наблюдаются нерегулярные шероховатости, высота которых сопоставима с таковой до облучения. Детальные исследования с помощью сканирующего электронного микроскопа показали явное наличие поверхностного плавления. Похожая ситу-

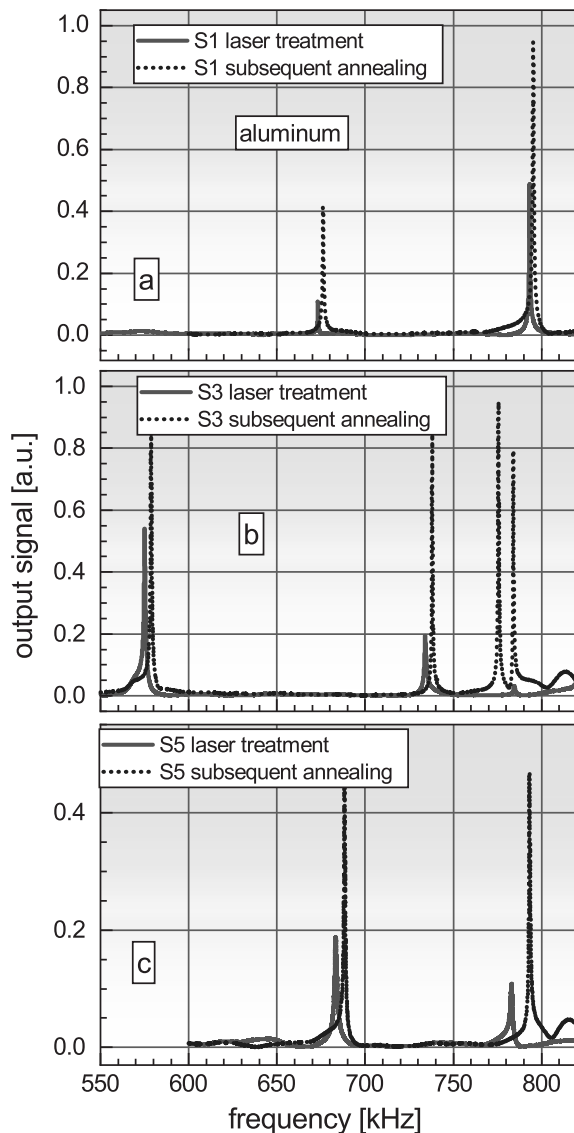


Рис. 2. (Цветной онлайн) Начальные участки спектров резонансной ультразвуковой спектроскопии образцов алюминия S1 (a), S3 (b) и S5 (c), обработанных УФ лазерными импульсами с плотностью энергии 1.1, 2.4 и 5.3 Дж/см², соответственно. Показаны также спектры тех же образцов после нагрева до 850 К со скоростью 3 К/мин. Видно, что резонансные частоты во всех случаях после отжига увеличиваются

ация имеет место и в случае обработки с другими плотностями энергии лазера.

Спектры РУС исследованных образцов в полном диапазоне резонансных частот ($500 \text{ кГц} < f < 1300 \text{ кГц}$) имеют 10–12 пиков, отвечающих различным модулям упругости и различным интерференционным модам вследствие непараллельности граней и других геометрических

дефектов образцов. На рис. 2 показаны начальные участки спектров РУС образцов S1, S3 и S5 после лазерного воздействия энергией 1.1 Дж/см² (a), 2.4 Дж/см² (b) и 5.3 Дж/см² (c), последующего отжига посредством нагрева до 850 К и медленного охлаждения, показывающие наличие нескольких резонансов. Различия в абсолютных значениях резонансных частот для разных образцов обусловлены отличием их геометрических размеров. Видно, что резонансные частоты облученных образцов во всех случаях несколько ниже таковых, реализующихся после отжига, а высоты резонансов после отжига значительно увеличиваются, что однозначно указывает на уменьшение дефектности образцов. Как известно, наименьшая резонансная частота отвечает чисто сдвиговому колебанию и контролируется модулем сдвига C_{44} [17]. Именно этот модуль (обозначаемый как G в дальнейшем) и представляет наибольший интерес в настоящем исследовании.

В таблице представлены соответствующие модулю сдвига резонансные частоты образцов S1, S3 и S5 после лазерного воздействия (f_{irr}) и последующего нагрева до 850 К (f_{ann}) для трех плотностей энергии W_p . Показаны также относительные изменения модуля сдвига, рассчитанные как

$$\Delta G/G = f_{irr}^2/f_{ann}^2 - 1.$$

Как видно, модуль сдвига образца S1 после облучения энергией $W_p = 1.1 \text{ Дж/см}^2$ на 0.87% ниже тако-

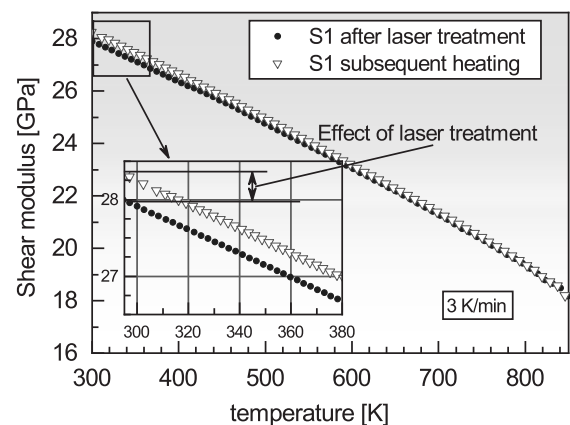


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурные зависимости модуля сдвига образца S1 после лазерного воздействия и повторного нагрева до 850 К. На вставке показаны начальные участки этих зависимостей. Стрелками показано влияние лазерного воздействия на модуль сдвига отожженного образца. Видно, что нагрев до 850 К устраняет влияние лазерного воздействия на модуль сдвига

Таблица. Резонансные частоты сдвиговых колебаний после лазерного воздействия (f_{irr}) и последующего нагрева до 850 К (f_{ann}), а также соответствующие относительные изменения модуля сдвига $\Delta G/G$ для образцов S1, S3 и S5, подвергнутых лазерному воздействию с указанными плотностями энергии W_p . Ошибка в определении резонансных частот и их изменений при отжиге составляет порядка 5 ppm

№ Образец	W_p , Дж/см ²	f_{irr} , кГц	f_{ann} , кГц	$\Delta G/G$
S1	1.1	673.20	676.16	−0.0087
S3	2.4	573.98	578.17	−0.0127
S5	5.3	683.23	688.24	−0.0145

вого после отжига. Снижение модуля после лазерного воздействия растет с энергией воздействующего излучения, так что при $W_p = 5.3$ Дж/см² оно составляет 1.45% для образца S5. Это и есть диаэластический эффект, обсуждаемый в настоящей работе. Отметим, что этот эффект имеет место не только для модуля сдвига, но и для всех других упругих модулей, так как все резонансные частоты спектра РУС снижаются в результате лазерного воздействия (в частности, см. рис. 2). Подчеркнем, что какие-либо аналогичные данные в литературе нам неизвестны.

На рис. 3 показаны температурные зависимости модуля сдвига образца S1 после лазерного воздействия и последующего нагрева до 850 К. Видно, что значения G вблизи этой температуры совпадают, свидетельствуя об исчезновении эффекта лазерного воздействия после нагрева. При этом значение модуля сдвига при комнатной температуре становится близким к табличному [18].

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Металлы, в том числе исследуемый алюминий, поглощают свет путем передачи энергии фотона электронной составляющей скин-слоя толщиной около 10 нм [19]. Передача энергии от электронной подсистемы к фононам занимает время в несколько пикосекунд. Время нагрева примерно равно длительности лазерного импульса и составляет величину порядка 10 нс. При этом при любой из реализованных энергий лазерного воздействия W_p имеет место поверхностное плавление алюминия, что подтверждается вышеупомянутыми наблюдениями поверхности облученных образцов с помощью сканирующей электронной микроскопии. Одновременно с процессом нагрева поверхности происходит отвод тепла за счет термодиффузии. За время лазерно-

го импульса материал прогревается на характерную глубину

$$L = 2\sqrt{\alpha\tau}. \quad (1)$$

Для алюминия температуропроводность $\alpha = 8.4 \cdot 10^{-5}$ м²/с и тогда по формуле (1) при длительности лазерного импульса $\tau = 10$ нс получаем глубину прогрева $L \approx 2$ мкм. После окончания лазерного импульса начинается процесс остывания нагретого участка. Время остывания определяется из уравнения [6]

$$t_c = \frac{4L^2}{\alpha\pi^2} \ln\left(\frac{8T_m}{T_0\pi^2}\right), \quad (2)$$

где $T_m = 933$ К — температура плавления алюминия, $T_0 = 300$ К — начальная температура. Используя выражение (2), получим время полного остывания поверхности после лазерного воздействия наносекундным импульсом $t_c \approx 15$ нс. При этом скорость охлаждения (заковки) из жидкого состояния можно оценить как $T_v/t_c \approx 2 \cdot 10^{11}$ К/с, где $T_v = 2792$ К — температура испарения алюминия. Как отмечалось выше, эта скорость недостаточна для аморфизации чистого металла. Таким образом, за время около 25 нс происходят процессы перехода поверхностного слоя из кристаллического состояния в жидкое и обратно.

Следуя изложенной во введении концепции плавления простых металлов, будем считать, что в результате плавления поверхностного слоя образуется большая концентрация дефектов типа межузельных гантелей, которые в результате последующей быстрой заковки оказываются «замороженными» в кристаллическую структуру. Основная особенность межузельной гантели состоит в том, что внешнее знакопеременное механическое напряжение приводит в колебательное движение 20-30 атомов вблизи ее ядра (атомная структура этого дефекта показана

в работах [11, 20]), вызывая значительную неупругую деформацию и соответствующее снижение модуля сдвига [11, 21]. Для модуля сдвига G при наличии межузельных гантелей с концентрацией c_i межузельная теория дает [10, 21]

$$G = G_0 \exp(-\alpha\beta_i c_i), \quad (3)$$

где G_0 — модуль сдвига бездефектного кристалла, безразмерная константа $\alpha \approx 1$ и β_i — безразмерная сдвиговая восприимчивость. Формула (3) показывает, что, если константа β_i известна, то, зная модуль сдвига дефектного кристалла, можно оценить концентрацию межузельных гантелей c_i и наоборот.

Грубая оценка в приближении Ройсса показывает, что относительное изменение сдвиговой податливости всего образца $\Delta S/S$ связано с изменением податливости проплавленного слоя $\Delta S_{irr}/S$ соотношением

$$\Delta S/S = (\Delta S_{irr}/S)(\Delta V/V),$$

где $\Delta V/V$ — отношение объема проплавленного слоя к объему образца. Как отмечено выше, образец проплавляется на характерную глубину $L = 2$ мкм. Тогда доля проплавленной части кубического образца с ребром a , имеющего 6 граней, есть

$$\Delta V/V = 6L/a = 6 \cdot 2 \cdot 10^{-6} / (2.2 \cdot 10^{-3}) \approx 6 \cdot 10^{-3}.$$

Так как при малых изменениях сдвиговой упругости $\Delta S/S = -\Delta G/G$, с помощью таблицы получаем, что значения $\Delta S/S$ лежат в пределах от 0.009 до 0.014, в зависимости от плотности энергии лазерного воздействия. Поскольку сдвиговая податливость равна обратному модулю сдвига, для величины $\Delta S_{irr}/S$ получаем значения от 1.5 до 2.3. Это соответствует значениям S_{irr} , равным от $2.4S$ до $3.4S$. Используя формулу (3), для податливости обученного кристалла можно принять

$$S_{irr} = \exp(\alpha\beta_i c_i)/G_0,$$

где для межузельных гантелей в алюминии произведение $\alpha\beta_i = 27$ [22]. Соответственно, концентрация межузельных гантелей c_i , способная обеспечить такую податливость проплавленного слоя, должна составлять от 0.033 до 0.045.

Полученная оценка, с учетом довольно приблизительного характера исходных данных для ее получения, представляется вполне разумной. Действительно, расчет концентрации межузельных гантелей для расплава алюминия тремя независимыми способами дает значение $c_i \approx 0.08$ [15], что согласуется с оценкой Гранато для меди $c_i \approx 0.09$ [10]. С другой

стороны, компьютерное моделирование плавления алюминия показало [23], что модуль сдвига уменьшается от 14.9 ГПа чуть ниже T_m до 1.8 ГПа чуть выше T_m (в соответствии с межузельной теорией модуль сдвига расплава мал, но нулевым не является). Соответственно, по формуле (3) получаем концентрацию межузельных гантелей при температуре плавления

$$c_i = \ln(14.9/1.8)/27 \approx 0.078,$$

что близко к приведенным выше оценкам. Наконец, определение предплавленной концентрации межузельных гантелей в кристалле Al на основе прецизионных измерений модуля сдвига дало значение $c_i \approx 0.004$ [12]. Приведенная оценка c_i после лазерного воздействия сопоставима со значениями величины при T_m , но, естественно, больше ее предплавленных значений.

Таким образом, выполненные оценки в целом соответствуют пониманию диаэластического эффекта в алюминии после лазерного воздействия как результата плавления тонкого приповерхностного слоя образца с сопутствующим резким ростом концентрации дефектов типа межузельных гантелей, которые за счет высокой скорости последующего охлаждения остаются в значительной степени в замороженными в кристалл при комнатной температуре. Эти замороженные межузельные гантели и определяют наблюдаемый диаэластический эффект.

Следует также указать на другие возможные механизмы понижения модуля сдвига после лазерной обработки. При воздействии лазерного импульса в образце возникают значительные термомеханические напряжения. Считая температуру на границе расплава равной температуре плавления алюминия, а в глубине образца равной или близкой к комнатной, получаем разность температур на гранях образца около 600 К. Таким образом, лазерные импульсы генерируют механические импульсы большой амплитуды, которые распространяются по всему образцу. Это соответствует относительной полной деформации, равной по порядку величины 10^{-2} . Это довольно большое значение, которое может приводить к пластической деформации образца посредством образования дислокаций. Рост плотности дислокаций, как хорошо известно, может приводить к снижению модуля сдвига [24]. Для оценки такого варианта лазерного воздействия необходимы оценки плотности дислокации в образцах после обработки.

Кроме того, при высоких интенсивностях лазерного излучения возможно возникновение ударных волн как следствие пробоя абляционного

факела [25]. В этом случае может иметь место ударно-волновое формирование нанозернистости облученного слоя, которое потенциально может вызвать появление диаэластического эффекта.

Более подробное исследование рассматриваемого явления может дать новую важную информацию о формировании дефектной системы кристалла в результате поверхностного лазерного плавления и последующего высокоскоростного охлаждения. Можно также вполне обоснованно ожидать, что такие эксперименты приведут к новой значимой информации о механизме плавления простых металлов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые на примере монокристаллического алюминия методом ультразвуковой резонансной спектроскопии (РУС) обнаружен диаэластический эффект (снижение упругих постоянных), обусловленный воздействием наносекундных лазерных импульсов ультрафиолетового диапазона, приводящих к плавлению тонкого приповерхностного слоя образца. Модуль сдвига в результате лазерного воздействия уменьшается от 0.87% до 1.45% с ростом плотности падающего излучения от 1.1 Дж/см² до 5.3 Дж/см². Термообработка путем нагрева в область предплавления температур восстанавливает модуль сдвига до исходных значений, а значительный рост амплитуды пиков РУС свидетельствует о существенном снижении дефектности материала.

Аргументируется гипотеза о том, что поверхностное плавление сопровождается образованием высокой концентрации межузельных дефектов в гантельной конфигурации, которые фиксируются в твердом состоянии за счет высокой скорости охлаждения проплавленного слоя. Обусловленная этими дефектами неупругая деформация и вызывает наблюдаемый диаэластический эффект.

Отмечены возможности и других интерпретаций этого явления.

Благодарности. Авторы благодарны профессору Д. Л. Мерсону (научно-исследовательский институт перспективных технологий, г. Тольятти) за помощь в подготовке образцов, а также профессору И. А. Каплунову, доценту А.И. Ивановой (Тверской госуниверситет) и доценту В. В. Чеверику (НИТУ МИСиС) за проведение электронно-микроскопических исследований.

Финансирование. Измерения РУС и анализ результатов на основе межузельной теории проведены

при поддержке Российского научного фонда, грант № 23-12-00162. Лазерное облучение, структурные исследования и частично обсуждение результатов выполнены при поддержке Российского научного фонда, грант № 24-19-00727, с использованием ресурсов ЦКП ТвГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Анисимов, Я. А. Имас, Г. С. Романов, Ю. В. Ходыко, *Действие излучения большой мощности на металлы*, Наука, Москва (1970).
2. О. Звелто, *Принципы лазеров*, Лань, Санкт-Петербург (2008).
3. В. Ю. Хомич, В. А. Шмаков, УФН **185**, 489 (2015).
4. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит, Москва (2012).
5. S. I. Ashitkov, S. A. Romashevskii, P. S. Komarov, A. A. Burmistrov, V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, and M. B. Agranat, *Quantum Electronics* **45**, 547 (2015).
6. В. Ю. Железнов, Т. В. Малинский, С. И. Миколуцкий, В. Е. Рогалин, С. А. Филин, Ю. В. Хомич, В. А. Ямщиков, И. А. Каплунов, А. И. Иванова, *Письма в ЖТФ*, **47**, 18 (2021).
7. M. von Allmen, S. S. Lau, M. Mäenpää, and B.-Y. Tsaur, *Appl. Phys. Lett.* **36**, 205 (1980).
8. L. Zhong, J. Wang, H. Sheng, Z. Zhang, and S. X. Mao, *Nature* **512**, 177 (2014).
9. X. Tong, Y.-E. Zhang, B.-S. Shang, H.-P. Zhang, Z. Li, Y. Zhang, G. Wang, Y.-H. Liu, Y. Zhao, B. Zhang, H.-B. Ke, J. Zhou, H.-Y. Bai, and W.-H. Wang, *Nature Mater.* **23**, 1193 (2024).
10. A. V. Granato, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 974 (1992).
11. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, УФН **193**, 717 (2023).
12. E. V. Safonova, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov, A. Yu. Vinogradov, N. P. Kobelev, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter.* **28**, 1 (2016).
13. Е. В. Гончарова, А. С. Макаров, Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ*, **106**, 39 (2017).
14. Е. В. Сафонова, Р. А. Кончаков, Ю. П. Митрофанов, Н. П. Кобелев, А. Ю. Виноградов, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ*, **103**, 861 (2016).

15. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, А. С. Аронин, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ, **113** 341 (2021).
16. J. M. Liu, Optics Lett. **7**, 196 (1982).
17. F. F. Balakirev, S. M. Ennaceur, R. J. Migliori, B. Maiorov, and A. Migliori, Rev. Sci. Instrum. **90**, 121401 (2019).
18. G. Simmons and, H. Wang, *Single crystals elastic constants and calculated aggregate properties: A Handbook*, Second Edition, The MIT Press, Cambridge, MA (1971).
19. А. В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, Физматлит, Москва (1961).
20. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, Г.В. Афонин, М. А. Кретьева, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **109**, 473 (2019).
21. A. V. Granato, Eur. J. Phys. B **87**, 18 (2014).
22. C. A. Gordon and A. V. Granato, Mater. Sci. Eng. A **370**, 83 (2004).
23. M. Forsblom and G. Grimvall, Nature Mater. **4**, 388 (2005).
24. A. S. Nowick and B. S. Berry, *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press, New York, London (1972).
25. A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, and L. V. Seleznev, Phys. Rev. E **82**, 016404 (2010).

ДВУМЕРНЫЕ МАГНИТОПЛАЗМОНЫ В ПОЛОСЕ КОНЕЧНОЙ ШИРИНЫ

Р. З. Витлина^{a}, Л. И. Магарилл^{a,b**}, А. В. Чаплик^{a***}*

*^a Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

*^b Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2024 г.,
после переработки 1 августа 2024 г.
Принята к публикации 25 сентября 2024 г.

Влияние границ образца на спектр магнитоплазменных колебаний двумерного электронного газа исследовано на примере прямолинейной полосы. Как и следовало ожидать, при длине волны плазмона много большей ширины полосы дисперсия магнитоплазмона следует формуле для плазменных волн в одномерной системе в смысле зависимости от волнового вектора, однако коэффициент перед главным членом зависит от магнитного поля. Найдены законы дисперсии внутриволноводных плазмонов в случае заселения одной и двух подзон, деполяризационный сдвиг межволноводного плазмона и пространственное распределение электрического поля плазменной волны по поперечной координате. Концентрационные и магнитополевые зависимости плазменной частоты найдены численными методами.

DOI: 10.31857/S0044451025010080

1. ВВЕДЕНИЕ

Краевой магнитоплазмон (КМП) в двумерной (2D) электронной системе был впервые теоретически исследован в работах Волкова и Михайлова [1, 2]. Авторы провели как классическое, так и квантовое рассмотрение проблемы для полуплоскости и нашли закон дисперсии КМП $\omega(k)$, где k — одномерный импульс плазменной волны вдоль края образца. Естественно поставить вопрос о роли границ в реальном эксперименте, в частности о плазменных волнах в полосе заданной ширины, когда следует учесть также влияние противоположного края. Такая постановка задачи была декларирована во введении к статье Балева и Василюса [3]. Авторы сформулировали модель полосы с «мягкими» стенками: параболический потенциал для электронов на границах полосы. Однако в дальнейшем при рассмотрении плазменных колебаний ограничились

фактически учетом лишь одного края и получили, естественно, уже известный результат для частоты плазмона. Между тем наличие второй границы приводит к качественно новым чертам явления: следует, строго говоря, рассматривать не краевой плазмон, а собственные моды плоского плазменного волновода (при этом надо иметь в виду, что в таком «волноводе» ограничено в одном направлении лишь движение электронов, тогда как электрическое поле плазменной волны простирается формально до бесконечности). В рамках классического гидродинамического описания 2D-плазмы такая задача решена в работах [4, 5]. Плазменный спектр в полосе 2D-электронов в условиях сильного экранирования металлическим электродом найден в работе [6] в рамках классического рассмотрения в приближении локальной емкости.

В предлагаемой работе мы строим квантовую теорию магнитоплазменных волн в полосе 2D-электронного газа заданной ширины $L = 2w$. Граничные условия для волновых функций соответствуют твердым стенкам, т. е. поперечное к полосе движение (вдоль оси x) соответствует «обрезанному» при $x = \pm w$ гармоническому осциллятору с циклотронной частотой ω_c и с точкой подвеса

* E-mail: ritta@isp.nsc.ru

** E-mail: levni@isp.nsc.ru

*** E-mail: chaplik@isp.nsc.ru

(suspension point) $X = -pl^2$, где p — сохраняющаяся в калибровке Ландау y -компонента импульса электрона, l — магнитная длина ($\hbar = 1$). Для уровня Ландау номера n волновая функция имеет вид

$$\Psi_{n,X}(x, y) = N_{n,X} \psi_{n,X}(x) \frac{\exp(i p y)}{\sqrt{L_y}}. \quad (1)$$

Здесь $N_{n,X}$ — нормировочный коэффициент, L_y — длина полосы. Для функции $\psi_{n,X}(x)$ имеем (см., например, [7])

$$\begin{aligned} \psi_{n,X}(x) = & e^{-(x-X)^2/2l^2} \times \\ & \times \left[\Phi(-q_n(X)/2, 1/2, (x-X)^2/l^2) - \right. \\ & \left. - B(x-X) \Phi((1-q_n(X))/2, 3/2, (x-X)^2/l^2) \right]. \quad (2) \end{aligned}$$

Первый индекс вырожденной гипергеометрической функции в (2) определяет энергию подзон Ландау:

$$q_n(X) = E_n(X)/\omega_c - 1/2$$

через дисперсионное уравнение, следующее из граничных условий $\psi_{n,X}(x = \pm w) = 0$. Из этих же условий находится константа B .

Дисперсия подзон Ландау $E_n(X)$ хорошо известна, графики неоднократно приводились в литературе в связи с исследованиями квантового эффекта Холла (краевые каналы, краевые состояния). Функции $\psi_{n,X}(x)$ и $E_n(X)$ нужны для формулировки уравнения плазменных волн.

2. БАЗОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассматриваемая здесь задача относится к группе задач о плазменных колебаниях многокомпонентных низкоразмерных систем. Схема решения, т.е. нахождение собственных частот плазмонов таких систем через матричную диэлектрическую функцию в приближении самосогласованного поля изложена в [8] на примере двумерных систем — пленочные структуры типа квантовой ямы с более чем одним заселенным уровнем поперечного квантования, двойные квантовые ямы или многослойные сверхрешетки. В случае магнитоплазмонов в полосе 2D-электронного газа отдельным компонентам плазмы соответствуют группы электронов на различных уровнях Ландау (подзоны $E_n(X)$), т.е. одномерные системы. Поэтому меняется вид гриновской функции уравнения Пуассона: теперь $G_k(x - x') = -K_0(|k(x - x')|)/2\pi$, где K_0 — функция Макдональда. Другим существенным отличием от [8] является зависимость волновых функций

поперечного движения $\psi_{n,X}(x)$ (2) от продольного импульса электрона p через точку подвеса осциллятора. С учетом этих отличий уравнение для матричных элементов потенциала плазменной волны $\varphi(x)e^{iky}$ приобретает вид (мы учли, что правила отбора по импульсу вдоль полосы допускают лишь переходы $(n, X) \rightarrow (m, X + kl^2)$)

$$\begin{aligned} \varphi_{n,X;m,X+kl^2} = & \\ = & \frac{2e^2}{\varepsilon L_y} \sum_{m',n',X'} \frac{f(E_{m'}(X' + kl^2)) - f(E_{n'}(X'))}{E_{m'}(X' + kl^2) - E_{n'}(X') + \omega + i\delta} \times \\ & \times J_{m,n;m',n'}(X, X') \varphi_{n',X';m',X'+kl^2}, \quad (3) \end{aligned}$$

где ε — средняя диэлектрическая постоянная двух сред, разделенных 2D-электронным газом, f — фермиевские числа заполнения, а формфакторы $J_{mn;m'n'}$ определяются формулой

$$\begin{aligned} J_{m,n;m',n'}(X, X') = & \\ = & \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' \tilde{\psi}_{n,X}(x) \tilde{\psi}_{m,X+kl^2}(x) \times \\ & \times K_0(|k(x - x')|) \tilde{\psi}_{n',X'}(x') \tilde{\psi}_{m',X'+kl^2}(x'). \quad (4) \end{aligned}$$

В выражении (4) $\tilde{\psi}_{n,X}(x) = N_{n,X} \psi_{n,X}(x)$ — нормированная волновая функция поперечного движения. Таким образом, имеем систему линейных однородных интегральных уравнений для функций $\varphi_{n,X;m,X+kl^2}$, которые для краткости будем обозначать $\Phi_{nm}(X)$. При неограниченном дискретном спектре электронов число уравнений, а следовательно, и число различных плазменных мод также бесконечно, даже если заселенным будет только один уровень, например, $E_0(X)$. Недиагональные члены в (3) $m \neq n$ соответствуют виртуальным переходам с изменением энергии не меньшим ω_c , т.е. отвечают межподзонным плазмонам, спектр которых имеет щель $\Delta > \omega_c$ при $k = 0$. Если интересоваться только низкочастотной частью плазменного спектра $\omega \ll \omega_c$, то нужно ограничиться лишь случаем $m = n$ (внутриподзонные плазмоны) и дополнительно потребовать выполнения условия длинноволнового приближения $kl \ll 1$. Мы рассмотрим далее как внутри-, так и межподзонные плазмоны из низшей части спектра, т.е. те, которые связаны с уровнями $E_0(X)$ и $E_1(X)$.

3. ВНУТРИЗОННЫЙ ПЛАЗМОН НУЛЕВОЙ ПОДЗОНЫ

В этом случае вместо (3) имеем

$$\begin{aligned} \Phi_{00}(X) &= \\ &= \frac{e^2}{\pi \varepsilon l^2} \int dX' \frac{f(E_0(X' + kl^2)) - f(E_0(X'))}{E_0(X' + kl^2) - E_0(X') + \omega + i\delta} \times \\ &\quad \times J_{00,00}(X, X') \Phi_{00}(X'). \end{aligned} \quad (5)$$

Считая $k \ll p \sim p_F$ (p_F — фермиевский импульс), разложим в (5) разности до линейного по k члена. При этом в формфакторах J следует положить $k = 0$. При $T = 0$ в числителе появится $\delta(E_0(X') - E_F)$ (E_F — энергия Ферми) и интеграл сведется к сумме двух слагаемых — к сумме значений подынтегральной функции в точках $X' = \pm X_0$, где $\pm X_0$ — корни уравнения $E_0(X) = E_F$ ($E_0(X)$ — четная функция X).

Придавая в левой части (5) переменной X значения $\pm X_0$, придем к двум линейным однородным уравнениям для величин $\Phi_{\pm} \equiv \Phi_{00}(\pm X_0)$:

$$\begin{aligned} \Phi_+ &= \beta k \left(\frac{J_{+-}}{\omega - kV_0} \Phi_- - \frac{J_{++}}{\omega + kV_0} \Phi_+ \right), \\ \Phi_- &= \beta k \left(\frac{J_{--}}{\omega - kV_0} \Phi_- - \frac{J_{-+}}{\omega + kV_0} \Phi_+ \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\beta = e^2/\pi \varepsilon$, V_0 — фермиевская скорость в нулевой подзоне, а

$$J_{\pm\pm} = J_{00,00}(\pm X_0, \pm X_0),$$

$$J_{\pm\mp} = J_{00,00}(\pm X_0, \mp X_0).$$

Очевидно, что $J_{-+} = J_{+-}$. В Приложении показано, что $J_{--} = J_{++}$. Таким образом, имеются два независимых формфактора. Корни детерминанта системы (6) определяют частоту плазмона $\omega_0(k)$:

$$\omega_0^2(k) = k^2 (V_0^2 + \beta^2 (J_{++}^2 - J_{+-}^2) + 2\beta V_0 J_{++}). \quad (7)$$

В интегралах, определяющих $J_{\pm\pm}$, функции $\psi_0^2(x)$ локализованы вблизи точек $X_0, \pm X_0$ в окрестности порядка l . Поэтому для J_{++} аргумент K_0 мал при условии $k \rightarrow 0$ и можно воспользоваться асимптотической функцией Макдональда

$$K_0(|k(x - x')|) = -\ln(|k(x - x')|e^\gamma/2),$$

γ — константа Эйлера. Тогда для J_{++} получаем

$$J_{++} = \ln \left(\frac{2e^{-\gamma}}{|k|l} \right) + \bar{J}_{++}, \quad (8)$$

где

$$\bar{J}_{++} = \int dx dx' \tilde{\psi}_{0,X_0}^2(x) \ln \left(\frac{l}{|x - x'|} \right) \tilde{\psi}_{0,X_0}^2(x'). \quad (9)$$

Главный член в J_{++} есть $|\ln(|k|l)|$. Для формфактора J_{+-} аргумент у функции K_0 можно положить равным $2|k|X_0$, что может и не быть малой величиной даже при $kl \ll 1$. Тогда $J_{+-} = K_0(2|k|X_0)$ и дает логарифмический вклад при более сильном условии $kX_0 \ll 1$. При выполнении этого условия для частоты плазмона имеем

$$\begin{aligned} \omega_0^2(k) &= k^2 \left\{ 2\beta \left[\beta (\bar{J}_{++} - \bar{J}_{+-}) + V_0 \right] \ln \left(\frac{2e^{-\gamma}}{|k|l} \right) + \right. \\ &\quad \left. + V_0^2 + \beta^2 (\bar{J}_{++}^2 - \bar{J}_{+-}^2) + 2\beta V_0 \bar{J}_{++} \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Таким образом, получен ожидаемый результат для одномерного (1D) плазмона, найденный в [9, 10]:

$$\omega \sim k \sqrt{|\ln(|k|l)|}.$$

Заметим, однако, что в рассматриваемом нами случае зависимость частоты магнитоплазмона от концентрации электронов и от магнитного поля не может быть выражена аналитически. Другим важным отличием является изменение коэффициента перед главным членом с логарифмом: к фермиевской скорости V_0 (случай 1D-плазмона без магнитного поля) добавляется первое слагаемое в квадратной скобке в (10), которое может значительно превышать V_0 (например, при $N_L = 10^6 \text{ см}^{-1}$, $H = 1.6 \text{ Тл}$ превышение более, чем на порядок). Результаты численного расчета приведены ниже.

В заключение этого раздела заметим, что полученные в нем формулы применимы вплоть до самого начала плазмонного спектра ($k=0$), когда длина волны плазмона много больше всех характерных длин задачи, в том числе и ширины полосы L . В этом пределе система эффективно одномерна. Переход в полученных формулах к пределу полуплоскости, исследованной в [1, 2], невозможен, так как ему соответствует бесконечно большая L . Законы дисперсии различаются: в полуплоскости частота пропорциональна $\ln k$, а в полосе — $\sqrt{\ln k}$, как и должно быть для одномерных систем [9, 10].

4. ВНУТРИПОДЗОННЫЕ ПЛАЗМОНЫ В ДВУХПОДЗОННОЙ СИСТЕМЕ

Пусть теперь заселены состояния $E_0(X)$ и $E_1(X)$, но недиагональным вкладом $\Phi_{0,1}$ будем

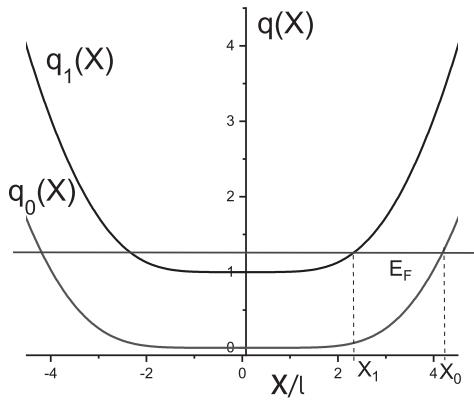


Рис. 1. Электронный спектр полосы. Показаны две нижние подзоны Ландау, горизонтальная прямая указывает положение уровня Ферми; $w/l = 4$

пренебрегать. Уровень Ферми лежит между $E_1(0)$ и $E_2(0)$ и пересекает кривые $E_0(X)$ и $E_1(X)$ соответственно в точках $\pm X_0$ и $\pm X_1$ (см. рис. 1). Четыре уравнения для $\Phi_{00}(\pm X_0)$ и $\Phi_{11}(\pm X_1)$ приводят к биквадратному уравнению для частот, корни которого равны (здесь мы приводим результаты для предельно малых импульсов плазмона $kX_0 \ll 1$, чтобы выяснить поведение $\omega(k)$ в самом начале спектра):

$$\omega_{ac}^2 = \frac{k^2}{2} \left(V_0^2 + V_1^2 + \beta^2 [\bar{J}_{0+;0+}^2 - \bar{J}_{0+;0-}^2 + \bar{J}_{1+;1+}^2 - \bar{J}_{1+;1-}^2 + 2\bar{J}_{0+;1+}^2 - 2\bar{J}_{0+;1-}^2] + 2\beta(V_0\bar{J}_{0+;0+} + V_1\bar{J}_{1+;1+}) \right), \quad (11)$$

$$\omega_{opt}^2 = \omega_{ac}^2 + 2k^2 \ln \left(\frac{2e^{-\gamma}}{|k|l} \right) \left[\beta(V_0 + V_1) + \beta^2 (\bar{J}_{0+;0+} - \bar{J}_{0+;0-} + \bar{J}_{1+;1+} - \bar{J}_{1+;1-} + 2\bar{J}_{0+;1+} - 2\bar{J}_{0+;1-}) \right]. \quad (12)$$

Здесь $V_{0,1}$ — фермиевские скорости в нулевой и первой подзонах; шесть независимых формфакторов вида $\bar{J}_{0+;0+}$, $\bar{J}_{0+;1+}$ и т.п. определяются аналогично тому, как это сделано в предыдущем разделе.

Подчеркнем, что в формуле (11) все логарифмические вклады в точности сокращаются. Соответствующий корень дисперсионного уравнения дает линейную зависимость $\omega_{ac}(k)$ при $k \rightarrow 0$, что

и служит основанием назвать эту ветвь акустической. Второй корень (оптическая ветвь, формула (12)) при $k \rightarrow 0$ дает уже известную сингулярность в нуле:

$$\omega_{opt}^2(k) \sim k^2 |\ln(|k|l)|.$$

5. МЕЖПОДЗОННЫЙ ПЛАЗМОН В ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЕ

Ранг характеристического детерминанта при учете N подзон равен N^2 , т.к. диэлектрическая функция есть матрица 4-го ранга. Из N^2 корней N соответствуют внутривозонным плазмонам, а в остальных $N(N-1)$ каждая пара дает одну межподзонную ветвь, число которых, таким образом, равно $N(N-1)/2$. Мы рассмотрим низшую из них, связанную с уровнями E_0 и E_1 . Решение задачи в общем виде (при произвольных импульсах плазмона k) связано с чрезвычайно сложными численными расчетами, поскольку ни законы дисперсии электронов, ни формфакторы не выражаются в аналитическом виде. Ограничимся поэтому нахождением пороговой частоты $\omega_{01}(k=0)$, определяющей щель в спектре межподзонного плазмона. Отличие этой величины от минимального расстояния между уровнями E_0 и E_1 известно под названием деполаризационного сдвига.

Если в системе (3) оставить лишь уравнения с $m=0,1$ и $n=0,1$ и перейти к пределу $k \rightarrow 0$, то в правых частях останется только недиагональный элемент φ , т.к. в диагональных разность чисел заполнения в числителе при $k=0$ обратится в нуль. В том же пределе функция $K_0(|k(x-x')|)$ заменяется выражением

$$\ln(2e^{-\gamma}/|k(x-x')|) = \ln(2e^{-\gamma}/|k|l) + \ln(l/|x-x'|).$$

Первое слагаемое не дает вклада в формфактор $J_{01,01}$ из-за ортогональности волновых функций $\psi_{0,X}(x)$ и $\psi_{1,X}(x)$. В результате приходим к уравнению

$$\Phi_{01}(X) = \frac{2\beta}{l^2} \int_{-X_0}^{X_0} dX' \times \times \frac{\Delta(X')}{\omega^2 - \Delta(X')^2} Q(X, X') \Phi_{01}(X'), \quad (13)$$

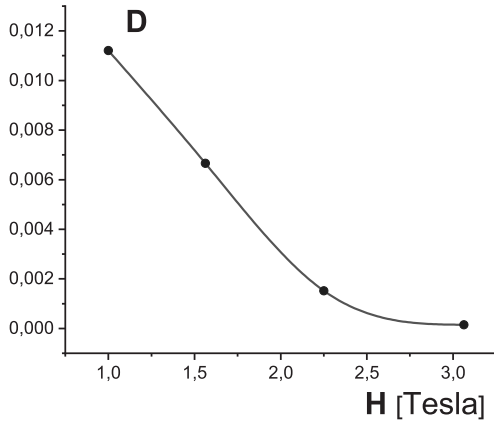


Рис. 2. Зависимость деполяризационного сдвига межподзонного плазмона на уровнях 0 и 1 от магнитного поля; $D = \Omega/\Delta(X=0) - 1$, $N_L = 0.47 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$, $L = 0.1 \text{ мкм}$

где $\Delta(X) = E_1(X) - E_0(X)$. В однородном интегральном уравнении (13) ω^2 является искомым собственным числом, причем нужно его минимальное значение ω_{min}^2 , а множитель $Q(X, X')$ в ядре уравнения равен

$$Q(X, X') = \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' \tilde{\psi}_{0,X}(x) \tilde{\psi}_{1,X}(x) \times \ln(l/|x - x'|) \tilde{\psi}_{0,X'}(x') \tilde{\psi}_{1,X'}(x'). \quad (14)$$

Значение ω_{min}^2 было найдено численно. Мы заменили интеграл соответствующей ему суммой Римана, разбив интервал интегрирования на большое число точек, т.е. свели задачу к нахождению собственных чисел системы линейных однородных уравнений, число которых равно числу точек разбиения. Деполяризационный сдвиг Ω определяется как разность минимальной частоты ω_{min} и минимального расстояния между уровнями $\Delta(0)$. Его зависимость от магнитного поля приведена на рис. 2.

Как известно, деполяризационный сдвиг определяет также частоту ИК-поглощения при межподзонном (в безграничной плоскости межуровневом) переходе, которая не равна расстоянию между уровнями из-за динамического экранирования электрического поля возбуждающей волны.

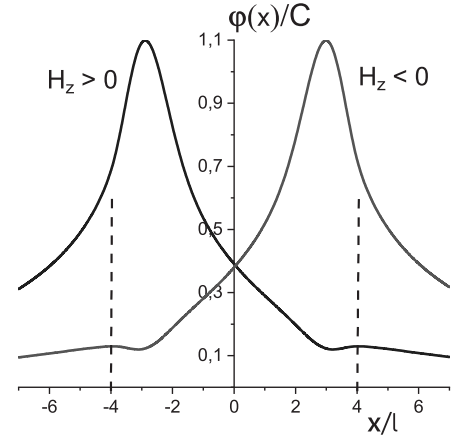


Рис. 3. Распределение потенциала плазменной волны по поперечной координате для двух противоположных направлений распространения или направлений магнитного поля; $N_L = 10^6 \text{ см}^{-1}$, $L = 0.2 \text{ мкм}$, $H = 1 \text{ Тл}$

6. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯ ПЛАЗМЕННОЙ ВОЛНЫ

В этом разделе мы получим выражение для координатной зависимости потенциала $\varphi(x)$ плазмона, соответствующего нулевой подзоне, т.е. самой нижней по частоте ветви плазменного спектра. В рамках теории самосогласованного поля $\varphi(x)$ подчиняется уравнению Пуассона (квазистатическое приближение, запаздывание не учитывается), в правой части которого стоит добавка к электронной плотности, индуцированная плазменной волной. В рассматриваемом случае нужно учесть лишь вклад в эту добавку от нулевой подзоны:

$$\begin{aligned} \Delta_{x,z} \varphi_0(x, z, k) - k^2 \varphi_0(x, z, k) = \\ = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon L_y} \delta(z) \sum_X \frac{f(E_0(X + kl^2)) - f(E_0(X))}{E_0(X + kl^2) - E_0(X) + \omega + i\delta} \times \\ \times \Phi_{00}(X) \tilde{\psi}_{0,X}^2(x). \end{aligned} \quad (15)$$

Уравнение (15) соответствует плазмону в виде плоской волны Ce^{iky} , а матричный элемент $\Phi_{00}(X)$ в правой части берется на плоскости полосы $z = 0$. Решение уравнения (15) записывается через гриновскую функцию $G(x - x')$, определенную в разд. 2 уже на плоскости $z = 0$. Получившийся интеграл для $\varphi_0(x)$ в длинноволновом пределе и при $T = 0$ вычисляется таким же образом, как при нахождении частоты $\omega_0(k)$. Теперь необходимо найти сами решения системы двух уравнений (6) для матричных

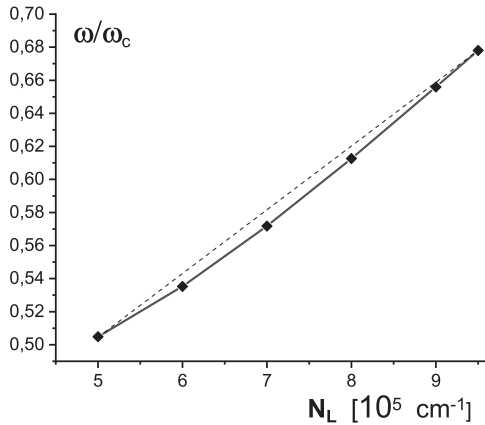


Рис. 4. Зависимость частоты плазмона от линейной концентрации электронов. Магнитное поле $H = 1$ Тл, ширина полосы $L = 0.2$ мкм

элементов $\Phi_{00}(X)$ в точках $\pm X_0$. Результат имеет вид (C — амплитуда волны, задаваемая условиями ее возбуждения)

$$\varphi_0(x) = Ck\beta \left(\frac{I_-(x)}{\omega_0(k) - kV_0} - \frac{RI_+(x)}{\omega_0(k) + kV_0} \right),$$

$$I_{\pm}(x) = \int_{-w}^w dx' K_0(|k(x-x')|) \tilde{\psi}_{0,\pm X_0}^2(x'), \quad (16)$$

$$R = \frac{\omega_0(k) + kV_0}{\omega_0(k) - kV_0} \frac{k\beta J_{++} - \omega_0(k) + kV_0}{k\beta J_{+-}}.$$

На рис. 3 показано поле плазмона $\varphi_0(x)$ для противоположных направлений распространения. Как видно, при заданном направлении распространения максимум $\varphi(x)$ имеется лишь у какого-то одного края полосы. Этот результат был получен в работе [2] в рамках гидродинамического подхода.

Такое же зеркальное отображение имеет место при изменении направления магнитного поля: легко понять, что под X следует понимать $-pl^2 \text{sign}(H)$, а $l^2 = c/|eH|$. Поэтому при смене знака H точки X_0 и $-X_0$ меняются местами. Это «отражение» поля плазмона относительно срединной линии полосы при изменении знака магнитного поля в принципе доступно экспериментальному наблюдению. При $l \ll w$ и при энергии Ферми такой, что точки $\pm X_0$ близки к краям полосы, максимум $\varphi(x)$ также близок к одному из краев, и в этом смысле такую волну можно назвать краевым магнитоплазмон.

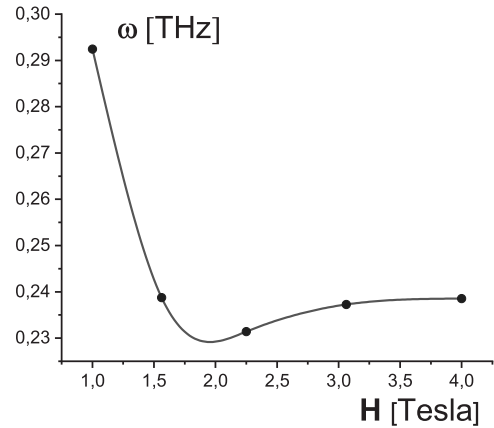


Рис. 5. Магнито-плазменная зависимость частоты плазмона; $N_L = 10^6 \text{ см}^{-1}$, $L = 0.2$ мкм, $k = 0.4 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$

7. ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Дисперсия электрона $E_0(p)$ (см. рис. 1) существенно отличается от стандартной параболической $p^2/2m$. Соответственно, и все характеристики магнито-плазмона в полосе (зависимость частоты от концентрации электронов и от магнитного поля) выглядят необычно. Для внутриподзонного плазмона нулевой подзоны система эффективно одномерна, поэтому $p_F = \pi N_L/2$, где N_L — линейная плотность электронов (спиновым расщеплением пренебрегаем), а $X_0 = \pi N_L l^2/2$. Зависимость E_F от N_L дается, следовательно, правой половиной нижней кривой на рис. 1. Зависимость частоты ω_0 от линейной плотности содержится в фермиевской скорости V_0 и через X_0 в факторах, входящих в формулу (7). Результаты приведены на рис. 4.

Пунктирная прямая на этом рисунке проведена, чтобы показать суперлинейный характер зависимости. Напомним в связи с этим, что классический 2D-плазмон имеет частоту, сублинейно зависящую от поверхностной плотности N_s :

$$\omega = (\omega_c^2 + \omega_p^2)^{1/2},$$

где $\omega_p^2 \propto N_s$.

Магнитная дисперсия плазмона еще более необычна: кривая на рис. 5 имеет минимум при $H \approx 2$ Тл. Дело в том, что, как видно из (10), зависимость частоты плазмона от магнитного поля обусловлена вкладами двух типов. Члены, содержащие фермиевскую скорость V_0 , обеспечивают

падающий участок кривой на рис. 5, поскольку при заданной плотности уровень Ферми быстро опускается с ростом H и приближается к плоскому участку электронной дисперсии $E_0(p)$, где V_0 обращается в нуль. Тогда главным остается первое (кулоновское) слагаемое в (10), которое дает логарифмически медленный рост частоты.

Для деполяризационного сдвига (рис. 2) характерно быстрое убывание при относительно небольшом увеличении H : более, чем на порядок при $\delta H/H = 75\%$. С увеличением поля поведение волновых функций электронов приближается к тому, которое реализуется в безграничной плоскости, так как уменьшается влияние границ полосы. Но в бесконечной плоскости $\Omega = 0$, поскольку в сильном магнитном поле отсутствует экранирование (во всяком случае линейное) и вместе с ним отсутствуют возмущения плотности электронов, линейные по возмущающему потенциалу.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что на магнитоплазменные колебания двумерного электронного газа существенно влияет учет границ образца. Математически задача значительно усложняется нестандартным законом дисперсии «замагниченных» электронов – зависимостью энергии от сохраняющейся компоненты импульса в калибровке Ландау. В простом случае прямолинейной полосы аналитически удастся найти лишь дисперсию внутриподзонных плазмонов в длинноволновом пределе, относящихся к нижней части спектра плазменных колебаний, содержащего, вообще говоря, бесконечное число ветвей. Концентрационные и магнитопольные зависимости плазменной частоты найдены численными методами.

Благодарности. Авторы благодарны В. А. Волкову и И. В. Кукушкину за помощь в ознакомлении с библиографией вопроса, а также А. В. Ненашеву за полезные советы при проведении численных расчетов.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь мы покажем справедливость соотношения $J_{--} = J_{++}$. Для этого нам понадобится выражение для $\psi_{n,X}(x)$, уже учитывающее граничные условия. Оно имеет вид

$$\psi_{n,X}(x) = e^{-(x-X)^2/2l^2} \times$$

$$\times \left[\Phi(-q_n(X)/2, 1/2, (x-X)^2/l^2) - \Phi((1-q_n(X))/2, 3/2, (x-X)^2/l^2) \times \frac{(x-X)\Phi(-q_n(X)/2, 1/2, (w-X)^2/l^2)}{(w-X)\Phi((1-q_n(X))/2, 3/2, (w-X)^2/l^2)} \right] \quad (17)$$

Кроме того, необходим явный вид уравнения, определяющего спектр электрона, т. е. параметр $q_n(X)$. Для него имеем

$$F(q_n(X)) = 0, \quad (18)$$

$$F(q) = \frac{\Phi(-q/2, 1/2, (w-X)^2/l^2)}{(w-X)\Phi((1-q)/2, 3/2, (w-X)^2/l^2)} + \frac{\Phi(-q/2, 1/2, (w+X)^2/l^2)}{(w+X)\Phi((1-q)/2, 3/2, (w+X)^2/l^2)}. \quad (19)$$

Используя явные выражения для формфакторов $J_{\pm\pm}$, запишем разность $J_{--} - J_{++}$:

$$J_{--} - J_{++} = \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' K_0(|k(x-x')|) \times \\ \times \left[N_{0,-X}^4 \psi_{0,-X}^2(x) \psi_{0,-X}^2(x') - N_{0,X}^4 \psi_{0,X}^2(x) \psi_{0,X}^2(x') \right], \quad (20)$$

где $\psi_{n,X}(x)$ определена в (17). Сделав замену переменных интегрирования в первом слагаемом в квадратных скобках (20), приходим к выражению

$$J_{--} - J_{++} = \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' K_0(|k(x-x')|) \times \\ \times \left[N_{0,-X}^4 \psi_{0,-X}^2(-x) \psi_{0,-X}^2(-x') - N_{0,X}^4 \psi_{0,X}^2(x) \psi_{0,X}^2(x') \right]. \quad (21)$$

Видно, что для доказательства равенства $J_{--} = J_{++}$ достаточно показать, что выполняются соотношения $\psi_{0,-X}(-x) = \psi_{0,X}(x)$ и $N_{0,-X} = N_{0,X}$.

Воспользовавшись (17), получаем

$$\begin{aligned} \psi_{0,-X}(-x) - \psi_{0,X}(x) = & e^{-(x-X)^2/2l^2}(x-X) \times \\ & \times \Phi((1-q_0(X))/2, 3/2, (x-X)^2/l^2) \times \\ & \times \left[\frac{\Phi(-q_0(X)/2, 1/2, (w-X)^2/l^2)}{(w-X)\Phi((1-q_0(X))/2, 3/2, (w-X)^2/l^2)} + \right. \\ & \left. + \frac{\Phi(-q_0(X)/2, 1/2, (w+X)^2/l^2)}{(w+X)\Phi((1-q_0(X))/2, 3/2, (w+X)^2/l^2)} \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

В квадратные скобки в (22) заключена функция $F(q_0(X))$, определенная в (19), и следовательно

$$\psi_{0,-X}(-x) = \psi_{0,X}(x). \quad (23)$$

Для $N_{0,-X}$ имеем

$$N_{0,-X} = \left(\int_{-w}^w dx \psi_{0,-X}^2(x) \right)^{-1/2}.$$

Сделаем в интеграле по x замену $x \rightarrow -x$. В результате с учетом (23) доказывается четность нормировочного коэффициента по X .

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Волков, С. А. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **42**, 450 (1985).
2. В. А. Волков, С. А. Михайлов, ЖЭТФ **94**, 217 (1988).
3. O. G. Balev and V. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **59**, 2807 (1999).
4. I. L. Aleiner, D. Xue, and L. I. Glazman, Phys. Rev. B **51**, 13467 (1995).
5. G. Eliasson, J. Wu, P. Hawrylak, and J. J. Quonnn, Solid State Commun. **60**, 4111 (1986).
6. Д. А. Родионов, И. В. Загороднев, Письма в ЖЭТФ **118**, 90 (2023).
7. A. H. MacDonald and P. Streda, Phys. Rev. B **29**, 1616 (1984).
8. Р. З. Витлина, А. В. Чаплик, ЖЭТФ **81**, 1011 (1981).
9. A. V. Chaplik and M. V. Krashenninnikov, Surface Science **98**, 533 (1980).
10. S. Das Sarma and W. Y. Lai, Phys. Rev. B **32**, 1401 (1985).

КВАНТОВЫЙ $SU(3)$ -ФЕРРИМАГНЕТИК НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*А. С. Мартынов, Д. М. Дзедзисавили**

*Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 21 июля 2024 г.,
после переработки 30 августа 2024 г.
Принята к публикации 4 сентября 2024 г.

Построены фазовые диаграммы (магнитное поле H –одноионная анизотропия D) для трехподрешеточного $SU(3)$ -ферримагнетика на треугольной решетке с разными спинами подрешеток ($S = 1, 1/2, 1/2$) при различных значениях параметров обмена I (между спинами $S = 1$ и $S = 1/2$) и J (между спинами $S = 1/2$). Для корректного учета алгебры генераторов группы $SU(3)$, включающей квадрупольные операторы, использовалось представление операторов Хаббарда. Показано, что в зависимости от значений параметров системы могут быть реализованы ферримагнитные Y - или перевернутая Y (\bar{Y})-фазы, скошенная V -фаза (спины $S = 1/2$ параллельны), веерная W -фаза, а также коллинеарные ферримагнитная и ферромагнитная фазы. В случае $I < J$ на фазовой диаграмме возникает линия, на которой $SU(3)$ -ферримагнетик распадается на две независимые подсистемы, одна из которых парамагнитная со спинами $S = 1$, а вторая антиферромагнитная со спинами $S = 1/2$ в нулевом эффективном магнитном поле. В спин-волновом приближении рассчитаны зависимости средних значений квадрупольного момента и дипольных моментов трех подрешеток от магнитного поля и параметра одноионной анизотропии. Проанализирован спектр спин-волновых возбуждений как при $I > J$, так и при $I < J$. Показано, что при $I = J$ в $SU(3)$ -ферримагнетике возникает случайное вырождение, которое может быть снято при учете квантовых флуктуаций.

DOI: 10.31857/S0044451025010092

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время значительно возрос интерес к материалам, в которых релятивистское спин-орбитальное взаимодействие приводит к проявлению квантовых эффектов на макроскопическом уровне [1, 2]. Такие материалы принято называть квантовыми магнетиками [3]. Одним из наиболее ярких проявлений квантовых эффектов является значительное сокращение среднего значения спина в магнетиках с $S > 1/2$ [4]. Причина сокращения спина обусловлена учетом одноионной анизотропии (ОА), возникающей вследствие спин-орбитального взаимодействия, или учетом парных взаимодействий, связанных с высшими спиновыми инвариантами вида $(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g)^{2S}$ [5–15]. Для магнитных систем, в

которых указанные негейзенберговские взаимодействия достаточно сильны, были обнаружены фазы спинового нематика, которые характеризуются нулевой намагниченностью даже при нулевой температуре (т. е. полное сокращение спина), но в которых имеется спонтанное нарушение симметрии за счет квадрупольных параметров порядка (средних значений операторов, билинейных по компонентам спина) [10]. Усилению указанных квантовых эффектов способствуют фрустрации [2], низкая температура, низкая размерность системы [16], а также фактор многоподрешеточности.

Например, в многоподрешеточных ферримагнетиках с различными магнитными ионами проявление квантовых эффектов может быть значительно усилено за счет возможной компенсации эффективного поля, действующего на спины магнитоактивных ионов [17–26]. Действительно, как было показано в работе [27], в ферримагнетике с двумя подрешетками квантовое сокращение спина в анизотроп-

* E-mail: ddm@iph.krasn.ru

ной подрешетке (с $S = 1$) при низких температурах может быть существенно уменьшено под действием поля обменного взаимодействия со стороны изотропной подрешетки ($S = 1/2$). Если же имеется более двух подрешеток, то суммарное эффективное поле двух изотропных антиферромагнитно связанных подрешеток, действующее на ионы третьей анизотропной подрешетки, может обратиться в нуль, устраняя тем самым упомянутый механизм подавления квантового сокращения спина.

В этой связи одна из задач теории квантовых магнетиков видится в поиске такой микроскопической модели, которая позволила бы предсказать и изучить новые квантовые эффекты, имеющие перспективы как с экспериментальной точки зрения, так и с прикладной. С учетом сказанного выше очевидно, что один из путей в данном направлении состоит в изучении совместного действия нескольких различных аспектов, способствующих реализации явлений квантового магнетизма.

В контексте данного направления развития теории были выполнены, например, работы [28–30], в которых была предложена модель трехподрешеточного ферримагнетика со смешанными спинами $S = 1, 1/2, 1/2$ на треугольной решетке с изинговским обменным взаимодействием и ОА в подсистеме спинов с $S = 1$. В указанных работах главный акцент исследований, основанных на методе Монте-Карло, был сделан на построении фазовых диаграмм температура–ОА, а также на поиске интересного с технологической точки зрения режима компенсации, в котором достигается нулевая полная намагниченность при температуре ниже критической. Важно отметить, что наряду с ОА в подсистеме спинов $S = 1$ предложенная в [28–30] модель обладала такими важными свойствами, как низкая размерность и геометрическая фрустрация, которые, как отмечалось выше, способствуют усилению квантовых эффектов.

В недавней работе [31] авторами была исследована модель $SU(3)$ -ферримагнетика (SU3F), которая в основных моментах совпадает с моделью, предложенной в [28–30], однако имеет два важных обобщения. Во-первых, вместо изинговского обменного взаимодействия в модели SU3F используется изотропный гейзенберговский обмен. Как известно, в неколлинеарных магнитных структурах поперечные вклады в обменное взаимодействие являются источником нулевых квантовых колебаний и, как следствие, антиферромагнитных флуктуаций (АФ). Эти

АФ, так же как и ОА, могут приводить к квантовому сокращению спина, и поэтому квантовые эффекты, обусловленные АФ и ОА, следует различать. Второе важное отличие SU3F от модели, предложенной в [28–30], состоит в использовании разных значений интегралов I и J обменных взаимодействий между подрешетками со спином $S = 1$ и $S = 1/2$, и между двумя подрешетками с $S = 1/2$ соответственно. Как будет показано ниже, для разных соотношений между обменными интегралами фазовые диаграммы SU3F качественно отличаются.

Кроме того, необходимо указать на важную концептуальную особенность модели SU3F. Она связана с тем, что наличие немалой ОА, как известно [8–12, 14, 15, 27, 32–36], приводит к необходимости учета полного набора генераторов алгебры $SU(3)$, действующих в гильбертовом пространстве состояний спина $S = 1$. Поэтому для описания таких систем алгебры обычных спиновых операторов недостаточно. Чтобы подчеркнуть данное обстоятельство, предложенная в работе [31] модель была названа моделью квантового $SU(3)$ -ферримагнетика.

Общая особенность модели SU3F состоит в одновременном учете нескольких из перечисленных выше аспектов, способствующих проявлению квантовых эффектов: ОА, АФ, многоподрешеточность, низкая размерность, фрустрация обменных связей.

Исследование SU3F в работе [31] проводилось в отсутствие внешнего магнитного поля и при нулевой температуре. Были рассчитаны зависимости средних моментов подрешеток и квадрупольного момента от параметра ОА при различных соотношениях обменных интегралов I/J . Оказалось, что критическое значение ОА D_c , при котором SU3F переходит в квадрупольную фазу, может быть много меньше как I , так и J . Кроме того, при $I > J$ в зависимости полного момента M от параметра ОА наблюдалась точка компенсации, т. е. обращение в нуль M при $D < D_c$.

Данная работа является логическим продолжением проведенных в [31] исследований. Ее основная цель состоит в построении фазовой диаграммы SU3F в координатах внешнее магнитное поле — параметр ОА, а также в анализе модификации магнитной структуры и параметров порядка при пересечении границ различных фаз. Расчет энергии основного состояния и определение спиновой конфигурации, отвечающей данной энергии, проводятся в приближении среднего поля в пределе нулевых температур. Последнее условие, как известно, является

недостижимым для метода Монте-Карло, использованного в цитированных выше работах [28–30]. Для корректного учета алгебры генераторов группы $SU(3)$ в подсистеме спинов $S = 1$ применяется формализм операторов Хаббарда [11, 35, 37]. При расчете параметров порядка проводится бозонизация спиновых операторов: для подсистемы спинов $S = 1/2$ используются преобразования Гольштейна–Примакова, а для подсистемы спинов $S = 1$ — формализм индефинитной метрики [11, 14].

Дальнейшее изложение статьи организовано следующим образом. Во втором разделе сформулирован гамильтониан $SU(3)$ во внешнем магнитном поле, лежащем в плоскости легкого намагничивания. В разд. 3 проводится $SU(2)$ -преобразование спиновых операторов с $S = 1/2$, отвечающее повороту локальных осей координат. В разд. 4 проводится преобразование Гольштейна–Примакова для подсистемы спинов с $S = 1/2$. В пятом разделе описывается переход к представлению операторов Хаббарда и их трехкратное $SU(3)$ -преобразование для диагонализации одноионного гамильтониана подсистемы спинов с $S = 1$. Бозонизация операторов Хаббарда с последующим получением дисперсионного уравнения описывается в разд. 6. В седьмом и восьмом разделах анализируются особенности фазовых диаграмм и характер изменений параметров порядка при $I < J$ и $I > J$ соответственно. В разд. 9 продемонстрировано вырождение среднеполевого основного состояния $SU(3)$ при $I = J$. В разд. 10 обсуждаются изменения спектра спин-волновых возбуждений при увеличении магнитного поля при разных соотношениях параметров обмена. Основные выводы работы представлены в разд. 11.

2. МОДЕЛЬ $SU(3)$ -ФЕРРИМАГНЕТИКА

Кристаллическая структура рассматриваемого $SU(3)$ представлена на рис. 1. Красными кружками отмечены узлы подрешетки со значением спина $S = 1$, обозначаемой далее как L -подрешетка. Зеленым и синим цветом отмечены узлы подрешеток со значением спина $S = 1/2$. Эти подрешетки далее обозначаются символами F и G соответственно. Периодичность системы определяется одинаковыми по модулю базисными векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 . Векторы $\boldsymbol{\zeta}$ и $\boldsymbol{\xi}$ соединяют узлы из разных подрешеток.

Гамильтониан $SU(3)$ во внешнем магнитном поле может быть представлен в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_{exch} + \mathcal{H}_{field}, \quad (1)$$

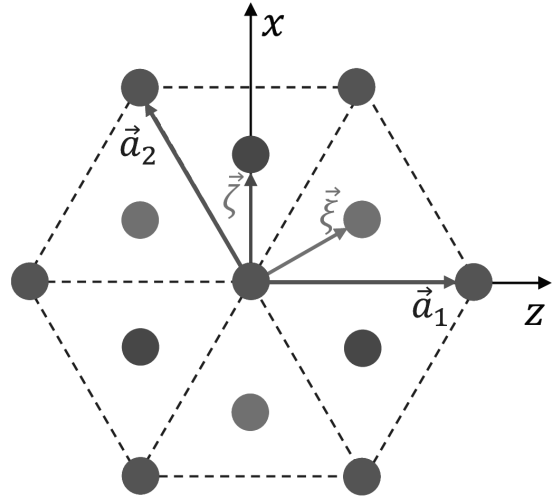


Рис. 1. Кристаллическая структура трехподрешеточного $SU(3)$ на треугольной решетке. Красными, зелеными и синими кружками обозначены положения узлов в L -, F - и G -подрешетках соответственно, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ — векторы решетки Браве, а $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\zeta}$ — векторы базиса

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{exch} &= J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g + I \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_l + I \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \mathbf{S}_l, \\ \mathcal{H}_A &= D \sum_l (S_l^y)^2, \\ \mathcal{H}_{field} &= -h \sum_f S_f^z - h \sum_g S_g^z - h_L \sum_l S_l^z. \end{aligned} \quad (2)$$

Оператор \mathcal{H}_{exch} описывает парное обменное взаимодействие между ближайшими спинами из разных подрешеток. Нижние индексы f , g и l у операторов спина обозначают узлы из F -, G - и L -подрешеток соответственно. Обменный интеграл J определяет интенсивность антиферромагнитных взаимодействий между ближайшими спинами из F - и G -подрешеток, а интеграл I — из $F(G)$ - и L -подрешеток. Фигурные скобки под тремя символами суммы в (2) означают, что суммирование ведется только по ближайшим узлам, и каждая пара узлов учитывается только один раз. Оператор \mathcal{H}_A описывает влияние ОА типа легкая плоскость на спины $S = 1$ в L -подрешетке. Параметр одноионной анизотропии D — положительный. Ось y направлена перпендикулярно плоскости ферримagnetика xz , являющейся, следовательно, плоскостью легкого намагничивания. Оператор \mathcal{H}_{field} учитывает зеемановскую энергию спинов во внешнем магнитном поле H , лежащем в плоскости

ферромагнетика (легкой плоскости) и определяющим параметрами $h = g\mu_B H$ и $h_L = g_L\mu_B H$, где μ_B — магнетон Бора, а g и g_L — факторы Ланде для $F(G)$ -подрешетки со спином $S = 1/2$ и L -подрешетки с $S = 1$ соответственно. В общем случае g -факторы могут различаться для разных подрешеток. В данной работе мы будем считать, что моменты формируются без участия орбитальных степеней свободы, т.е. являются чисто спиновыми, и, таким образом, $g_L = g = 2$.

Направление магнитного поля и тип ОА способствуют тому, что средний момент L -подрешетки \mathbf{R}_L оказывается ориентированным в плоскости xz , перпендикулярной оси анизотропии y . Кроме того, учитывая характер обменных взаимодействий, а также результаты работы [38], можно утверждать, что магнитная структура основного состояния SU3F при любых значениях D и H характеризуется планарной конфигурацией средних значений спинов. Поэтому без ограничения общности будем считать, что спины всех трех подрешеток лежат в плоскости ферромагнетика xz . Ось z исходной системы координат удобно направить вдоль магнитного поля.

3. SU(2)-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГАМИЛЬТОНИАНА

Вычисление энергии основного состояния SU3F целесообразно начать с проведения унитарного преобразования гамильтониана \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}(\theta_F, \theta_G) = U_2(\theta_F, \theta_G) \mathcal{H} U_2^\dagger(\theta_F, \theta_G), \quad (3)$$

с оператором

$$U_2(\theta) = \prod_{f \in F} \exp(-i\theta_F S_f^y) \prod_{g \in G} \exp(-i\theta_G S_g^y). \quad (4)$$

Преобразование (3) позволяет перейти для F - и G -подрешеток к новым локальным координатам, в которых оси квантования z' и z'' повернуты на углы θ_F и θ_G вокруг оси y и направлены вдоль равновесных намагниченностей \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G соответственно (см. рис. 2).

Унитарное преобразование (3) гамильтониана (1) отвечает следующей формальной замене спиновых операторов из F - и G -подрешеток [39]:

$$\begin{aligned} S_f^x &\rightarrow S_f^x \cos \theta_F + S_f^z \sin \theta_F, & S_f^y &\rightarrow S_f^y, \\ S_f^z &\rightarrow S_f^z \cos \theta_F - S_f^x \sin \theta_F, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} S_g^x &\rightarrow S_g^x \cos \theta_G + S_g^z \sin \theta_G, & S_g^y &\rightarrow S_g^y, \\ S_g^z &\rightarrow S_g^z \cos \theta_G - S_g^x \sin \theta_G. \end{aligned} \quad (6)$$

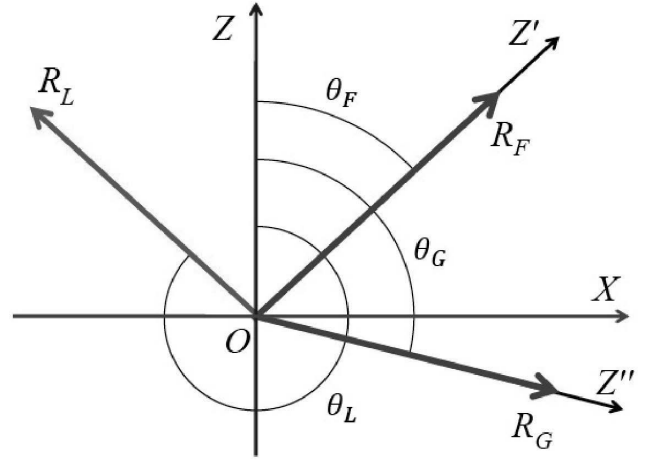


Рис. 2. Поворот локальных осей координат при унитарном преобразовании (3). В F - и G -подрешетках с $S = 1/2$ оси z поворачиваются на углы θ_F и θ_G и занимают новые положения z' и z'' . Локальные координаты в L -подсистеме с $S = 1$ остаются неизменными, а угол, образованный моментом R_L и осью z , обозначен посредством θ_L

В результате оператор Гамильтона (1) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & D \sum_l (S_l^y)^2 + \\ & + J \sum_{\{fg\}} \{ (S_f^x S_g^x + S_f^z S_g^z) \cos(\theta_F - \theta_G) + \\ & + S_f^y S_g^y + (S_f^z S_g^x - S_f^x S_g^z) \sin(\theta_F - \theta_G) \} + \\ & + I \sum_{\{fl\}} \{ (S_f^x S_l^x + S_f^z S_l^z) \cos \theta_F + S_f^y S_l^y + \\ & + (S_f^z S_l^x - S_f^x S_l^z) \sin \theta_F \} + \\ & + I \sum_{\{gl\}} \{ (S_g^x S_l^x + S_g^z S_l^z) \cos \theta_G + S_g^y S_l^y + \\ & + (S_g^z S_l^x - S_g^x S_l^z) \sin \theta_G \} - \\ & - h \sum_f \{ S_f^z \cos \theta_F - S_f^x \sin \theta_F \} - \\ & - h \sum_g \{ S_g^z \cos \theta_G - S_g^x \sin \theta_G \} - h_L \sum_l S_l^z, \end{aligned} \quad (7)$$

где операторы S_f^β и S_g^β ($\beta = x, y, z$), относящиеся к F - и G -подсистемам, определяют проекции спиновых моментов на соответствующую индексу β ось в новых (повернутых) локальных системах координат.

4. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГОЛЬШТЕЙНА – ПРИМАКОВА

Согласно изложенной во введении стратегии вычисления энергии основного состояния $SU(3)$, проведем преобразование Гольштейна – Примакова отдельно для F - и G -подрешеток:

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S - a_f^+ a_f} \cdot a_f, & S_f^z &= S - a_f^+ a_f, \\ S_g^+ &= \sqrt{2S - b_g^+ b_g} \cdot b_g, & S_g^z &= S - b_g^+ b_g, \end{aligned} \quad (8)$$

где операторы рождения $a_f^+(b_g^+)$ и уничтожения $a_f(b_g)$ бозонов описывают переходы спина в $F(G)$ -подрешетке на узле $f(g)$ из состояния $|\uparrow'\rangle(|\uparrow''\rangle)$, отвечающего ориентации спина вдоль оси $z'(z'')$, в состояние с противоположной ориентацией $|\downarrow'\rangle(|\downarrow''\rangle)$ и обратно.

Результат подстановки (8) в гамильтониан (7) запишем в виде

$$\mathcal{H} = E_0 + \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(2)}. \quad (9)$$

В этом выражении

$$\begin{aligned} E_0 &= J_0 S^2 N \cos(\theta_F - \theta_G) - \\ &- h S N (\cos \theta_F + \cos \theta_G), \end{aligned} \quad (10)$$

а следующие три операторных слагаемых $\mathcal{H}^{(n)}$ ($n = 0, 1, 2$) классифицируются по степеням бозе-операторов n . Величина N в формуле (10) обозначает число узлов в подрешетке.

Оператор $\mathcal{H}^{(0)}$ представляет собой сумму одноионных гамильтонианов L -подсистемы:

$$\mathcal{H}^{(0)} = \sum_l \mathcal{H}_0(l),$$

где

$$\mathcal{H}_0(l) = D(S_l^y)^2 + \bar{H}_z S_l^z + \bar{H}_x S_l^x, \quad (11)$$

а эффективные поля определяются выражениями

$$\begin{aligned} \bar{H}_z &= I_0 S (\cos \theta_F + \cos \theta_G) - h_L, \\ \bar{H}_x &= I_0 S (\sin \theta_F + \sin \theta_G), & I_0 &= 3I. \end{aligned} \quad (12)$$

Линейное по бозе-операторам слагаемое гамильтониана (9) запишем в следующей форме:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)} &= \sum_{\{fl\}} I \sqrt{\frac{S}{2}} [\cos \theta_F S_l^x - \sin \theta_F S_l^z] (a_f + a_f^+) + \\ &+ \sum_f \sqrt{\frac{S}{2}} [J_0 S \sin(\theta_G - \theta_F) + h \sin \theta_F] (a_f + a_f^+) + \\ &+ \sum_{\{gl\}} I \sqrt{\frac{S}{2}} [\cos \theta_G S_l^x - \sin \theta_G S_l^z] (b_g + b_g^+) + \\ &+ \sum_g \sqrt{\frac{S}{2}} [J_0 S \sin(\theta_F - \theta_G) + h \sin \theta_G] (b_g + b_g^+) + \\ &+ \frac{I}{i} \sqrt{\frac{S}{2}} \left\{ \sum_{\{fl\}} S_l^y (a_f - a_f^+) + \sum_{\{gl\}} S_l^y (b_g - b_g^+) \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $J_0 = 3J$.

Последнее слагаемое в выражении (9) описывает возбуждения в F - и G -подсистемах и имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} &= J \frac{S}{2} \sum_{\{f,g\}} \left\{ [(a_f + a_f^+)(b_g + b_g^+) - \right. \\ &- 2(a_f^+ a_f + b_g^+ b_g)] \cos(\theta_F - \theta_G) - \\ &- (a_f - a_f^+)(b_g - b_g^+) \left. \right\} - \\ &- I \sum_{\{f,l\}} (\cos \theta_F S_l^z + \sin \theta_F S_l^x) a_f^+ a_f - \\ &- I \sum_{\{g,l\}} (\cos \theta_G S_l^z + \sin \theta_G S_l^x) b_g^+ b_g + \\ &+ h \cos \theta_F \sum_f a_f^+ a_f + h \cos \theta_G \sum_g b_g^+ b_g. \end{aligned} \quad (14)$$

Далее, логика среднего поля диктует проведение замены в выражениях для $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ спинных операторов L -подсистемы их средними значениями. В рассматриваемом режиме нулевых температур усреднение операторов S_l^α ($\alpha = x, y, z$) достаточно проводить по основному состоянию одноузельного гамильтониана (11).

5. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ОДНОИОННОГО ГАМИЛЬТониАНА

Для диагонализации одноионного гамильтониана (11), как и в работе [31], воспользуемся подходом развитым в [40]. Перейдем от спинных операторов к операторам Хаббарда [37] $X_l^{m,n} = |m\rangle\langle n|$, где $m, n = \{-1, 0, +1\}$ — собственные значения операторов

ра S_l^z , а $|m\rangle$ и $|n\rangle$ — соответствующие собственные состояния: $S_l^z|n\rangle = n|n\rangle$. Подставляя выражения

$$\begin{aligned} S_l^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_l^{1,0} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,1} + X_l^{0,\bar{1}} \right), \\ S_l^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-X_l^{1,0} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,1} - X_l^{0,\bar{1}} \right), \\ (S_l^y)^2 &= \frac{1}{2} \left(X_l^{1,\bar{1}} + X_l^{\bar{1},1} - X_l^{1,1} - X_l^{\bar{1},\bar{1}} \right) + X_l^{0,0}, \\ S_l^z &= X_l^{1,1} - X_l^{\bar{1},\bar{1}}, \quad \bar{1} \equiv -1, \end{aligned} \quad (15)$$

описывающие переход к представлению операторов Хаббарда, в одноионный гамильтониан (11) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(l) &= \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z \right) X_l^{1,1} + D X_l^{0,0} + \\ &+ \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) X_l^{\bar{1},\bar{1}} - \frac{D}{2} \left(X_l^{1,\bar{1}} + X_l^{\bar{1},1} \right) + \\ &+ \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} \left(X_l^{1,0} + X_l^{0,1} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,\bar{1}} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

В отсутствие магнитного поля основное состояние системы вырождено относительно вращения вокруг оси y . Тогда, выбирая направление оси z вдоль вектора \mathbf{R}_L и учитывая справедливое в силу эквивалентности F - и G -подрешеток равенство $\theta_F = -\theta_G$, получаем, что величина \bar{H}_x обращается в нуль, а последнее слагаемое в выражении (16) исчезает. В этом случае гамильтониан $\mathcal{H}_0(l)$ перемешивает только два из трех состояния ($|+1\rangle$ и $|-1\rangle$) и для его диагонализации достаточно провести одно унитарное преобразование (см. [31]). Наличие магнитного поля приводит к тому, что перемешанными оказываются все три состояния $|n\rangle$ ($n = \{-1, 0, +1\}$), а для диагонализации одноионного гамильтониана необходимо проводить три последовательных преобразования.

Унитарный оператор $U_{nm}(\alpha, l)$ каждого преобразования определяется своим генератором $\Gamma_{nm}(l) = X_l^{nm} - X_l^{mn}$ из группы $SU(3)$, согласно выражению

$$\begin{aligned} U_{nm}(\alpha, l) &= \exp\{\alpha \Gamma_{nm}(l)\} = \\ &= 1 + (\cos \alpha - 1)(X_l^{nm} + X_l^{mn}) + \sin \alpha \Gamma_{nm}(l). \end{aligned} \quad (17)$$

Новые операторы Хаббарда $X_l^{\tilde{r}\tilde{s}} = |\tilde{r}, l\rangle\langle\tilde{s}, l|$, определенные посредством новых состояний

$$|\tilde{r}, l\rangle = U_{nm}(-\alpha, l)|r, l\rangle, \quad (18)$$

выражаются через исходные операторы Хаббарда следующим образом:

$$X_l^{\tilde{r}\tilde{s}} = U_{nm}(-\alpha, l) X_l^{rs} U_{nm}^+(-\alpha, l). \quad (19)$$

Тогда рассматриваемое унитарное преобразование сводится к простой замене в одноузельном гамильтониане:

$$X_l^{rs} \rightarrow U_{\tilde{n}\tilde{m}}(\alpha, l) X_l^{\tilde{r}\tilde{s}} U_{\tilde{n}\tilde{m}}^+(\alpha, l). \quad (20)$$

Явные выражения для правой части последней формулы в общем случае были получены в работе [40] и для полноты изложения приведены в Приложении А. Вариационный параметр α в формуле (17) подбирается из условия обращения в нуль численного коэффициента перед недиагональными операторами $X_l^{\tilde{n}\tilde{m}}$ и $X_l^{\tilde{m}\tilde{n}}$ в преобразованном с помощью подстановки (20) гамильтониане.

Проводя последовательно три унитарных преобразования с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,-1}(\alpha_3)$ и $U_{1,-1}(\alpha_1)$ по правилу (20) и сохраняя в конечном выражении прежние обозначения для индексов новых состояний $n = \{-1, 0, +1\}$ (т. е. без тильды), получаем диагональную по операторам Хаббарда форму для одноионного гамильтониана $\mathcal{H}_0(l)$:

$$\mathcal{H}_0(l) = \sum_n \epsilon_n X_l^{nn}, \quad n = -1, 0, +1. \quad (21)$$

Собственные значения ϵ_n одноионного гамильтониана можно представить в виде ($\bar{1} = -1$)

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= e_{1,\bar{1}} \sin^2 \alpha_1 + e_{1,1} \cos^2 \alpha_1 + e_{1,\bar{1}} \sin 2\alpha_1, \\ \epsilon_{\bar{1}} &= e_{\bar{1},\bar{1}} \cos^2 \alpha_1 + e_{1,1} \sin^2 \alpha_1 - e_{1,\bar{1}} \sin 2\alpha_1, \\ \epsilon_0 &= e_{0,0}, \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} e_{1,1} &= D \sin^2 \alpha_2 + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z \right) \cos^2 \alpha_2 + \\ &+ \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha_2, \\ e_{\bar{1},\bar{1}} &= D \cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \frac{D}{2} \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \\ &+ \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z \right) \sin^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 + \\ &+ \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) \cos^2 \alpha_3 - \\ &- \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2 \sin^2 \alpha_3), \\ e_{0,0} &= D \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \frac{D}{2} \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \\ &+ \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z \right) \sin^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) \sin^2 \alpha_3 + \\ &+ \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2 \cos^2 \alpha_3), \end{aligned} \quad (23)$$

$$e_{1,\bar{1}} = \left(\frac{\bar{H}_z}{2} - \frac{D}{4} \right) \sin(2\alpha_2) \sin \alpha_3 - \frac{D}{2} \cos \alpha_2 \cos \alpha_3 + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (-\cos 2\alpha_2 \sin \alpha_3 + \sin \alpha_2 \cos \alpha_3).$$

Из требования обращения в нуль коэффициентов при недиагональных X -операторах в преобразованном гамильтониане получается следующая система уравнений для углов α_j ($j = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \alpha_3 &= \frac{\left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) \sin 2\alpha_2 + \sqrt{2} \bar{H}_x \cos 2\alpha_2}{D \cos \alpha_2 - \sqrt{2} \bar{H}_x \sin \alpha_2}, \\ \operatorname{tg} 2\alpha_3 &= \frac{\sqrt{2} \bar{H}_x \cos \alpha_2 + D \sin \alpha_2}{2\bar{H}_z + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) \cos^2 \alpha_2 - \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha_2}, \quad (24) \end{aligned}$$

$$\operatorname{tg} 2\alpha_1 = 2e_{1,\bar{1}} / (e_{1,1} - e_{\bar{1},\bar{1}}).$$

Аналогичным образом применяя к представлению (15) последовательно три раза формулу (20) с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,\bar{1}}(\alpha_3)$ и $U_{1,\bar{1}}(\alpha_1)$, можно выразить спинные операторы S_l^x , S_l^y , S_l^z и $(S_l^y)^2$ через новые (преобразованные) X -операторы. Тогда коэффициенты разложения операторов спина S_l^α по новым операторам Хаббарда X_l^{nm} будут представлять матричные элементы спинных операторов по новым состояниям: $s_{n,m}^\alpha \equiv \langle n | S_l^\alpha | m \rangle$ ($\alpha = x, y, z$). Явные выражения для этих матричных элементов приведены в Приложении В.

В рамках приближения среднего поля следует заменить в гамильтониане $\mathcal{H}^{(1)}$ спинные операторы их средними значениями, т.е. диагональными матричными элементами $s_{n,n}^\alpha$, вычисленными по основному состоянию $|n\rangle$, отвечающему минимальному значению ϵ_n . Ниже мы будем выбирать набор решений уравнений (24) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$) так, чтобы состояние $|+1\rangle$ было основным.

Поскольку $s_{nn}^y = 0$ для любого n (см. Приложение В), то последние две суммы в формуле (13) для $\mathcal{H}^{(1)}$ обращаются в нуль. Сокращение же остальных слагаемых в (13) имеет место при выполнении равенств

$$\begin{aligned} I_0(s_{1,1}^x \cos \theta_F - s_{1,1}^z \sin \theta_F) + \\ + J_0 S \sin(\theta_G - \theta_F) + h \sin \theta_F &= 0, \\ I_0(s_{1,1}^x \cos \theta_G - s_{1,1}^z \sin \theta_G) + \\ + J_0 S \sin(\theta_F - \theta_G) + h \sin \theta_G &= 0, \end{aligned} \quad (25)$$

используемых далее для определения равновесных значений углов θ_F и θ_G . Угол θ_L , введенный на рис. 2

для наглядности, параметром согласования не является и может быть определен через отношение средних значений проекций спинных операторов S_l^z и S_l^x .

Магнитная структура основного состояния $SU(3)F$ определяется решениями пяти уравнений (24) и (25) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$), θ_F и θ_G с последующем выбором того набора решений, который отвечает минимальному значению среднеполевой энергии всей системы

$$E_{MF} = E_0 + N \epsilon_1, \quad (26)$$

где величины E_0 и ϵ_1 определены уравнениями (10) и (22) соответственно. В разд. 7 будут представлены фазовые h - D -диаграммы $SU(3)F$, рассчитанные на основе изложенной здесь методики.

6. БОЗОНИЗАЦИЯ L -ПОДСИСТЕМЫ И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

В рамках выбранного приближения энергия основного состояния E_{MF} определяется без учета АФ. Поэтому вклады от последнего слагаемого в гамильтониане (9), квадратичные по бозе-операторам, в выражении (26) для E_{MF} отсутствуют. Тем не менее при расчете зависимостей параметров порядка от магнитного поля и ОА требуется энергетический спектр спин-волновых возбуждений, и для определения этого спектра оператор $\mathcal{H}^{(2)}$ уже необходимо учитывать.

Для вычисления энергетического спектра в спин-волновом приближении выразим сначала спинные операторы через новые (преобразованные) X -операторы. Используя (15) и формулы из Приложения А, получим для S -операторов выражения вида

$$S_l^\alpha = \sum_{n,m} s_{nm}^\alpha X_l^{nm}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (27)$$

где матричные элементы s_{nm}^α приведены в Приложении В.

Далее учитывая, что спектр состояний $\mathcal{H}_0(l)$ характеризуется тремя уровнями, а основным состоянием одноионного гамильтониана является состояние $|+1\rangle$, введем, следуя работам [11, 14], два сорта бозе-операторов: c и d . Рождение одного $c(d)$ -бозона на узле l описывается действием оператора рождения c_l^+ (d_l^+) и отвечает переходу системы из «вакуумного» состояния $|+1\rangle$ в состояние $|0\rangle(|-1\rangle)$ с одним $c(d)$ -бозоном. Эрмитово-сопряженный оператор $c_l(d_l)$, действуя в обратном направлении, уничтожает $c(d)$ -бозон. Состояния с большим числом

бозонов отсекаются метрическим оператором как нефизические.

Представление операторов Хаббарда через бозе-операторы, предложенное в работе [40] в рамках формализма индефинитной метрики [41], имеет вид

$$\begin{aligned} X_l^{1,0} &= (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l) c_l, & X_l^{0,1} &= c_l^+, \\ X_l^{1,\bar{1}} &= (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l) d_l, & X_l^{\bar{1},1} &= d_l^+, \\ X_l^{0,\bar{1}} &= c_l^+ d_l, & X_l^{\bar{1},0} &= d_l^+ c_l, & X_l^{0,0} &= c_l^+ c_l, \\ X_l^{\bar{1},\bar{1}} &= d_l^+ d_l, & X_l^{1,1} &= (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l). \end{aligned} \quad (28)$$

Используем представление (28) в формулах (27) и подставим полученные выражения для S -операторов (см. Приложение С) в слагаемые $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ гамильтониана (9). В результате возникает выражение, в котором необходимо оставить только вклады не выше второго порядка по a , b , c и d -операторам. Проводя фурье-преобразование

$$\begin{aligned} a_f &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} a_k, & b_g &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikg} b_k, \\ c_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} c_k, & d_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} d_k, \end{aligned} \quad (29)$$

получаем искомый гамильтониан, который можно записать следующим образом:

$$\mathcal{H} = E_{MF} + \mathcal{H}_{SW}. \quad (30)$$

Здесь первое слагаемое E_{MF} отвечает энергии основного состояния в приближении среднего поля (см. формулу (26)), а второе слагаемое \mathcal{H}_{SW} описывает спин-волновые возбуждения и определяется выражением

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SW} = \sum_k \{ & E_a a_k^+ a_k + E_b b_k^+ b_k + E_c c_k^+ c_k + E_d d_k^+ d_k + \\ & + J_+ (\gamma_k a_k^+ b_k + \gamma_k^* b_k^+ a_k) \} + \\ & + J_- (\gamma_k a_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k^* a_k b_{-k}) + \\ & + I_{0F}^+ (\gamma_k c_k^+ a_k + \gamma_k^* a_k^+ c_k) + \\ & + I_{0F}^- (\gamma_k c_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* c_k a_{-k}) + \\ & + I_{1F}^+ (\gamma_k d_k^+ a_k + \gamma_k^* a_k^+ d_k) + \\ & + I_{1F}^- (\gamma_k d_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* d_k a_{-k}) + \\ & + I_{0G}^+ (\gamma_k^* c_k^+ b_k + \gamma_k b_k^+ c_k) + \\ & + I_{0G}^- (\gamma_k^* c_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k c_k b_{-k}) + \\ & + I_{1G}^+ (\gamma_k^* d_k^+ b_k + \gamma_k b_k^+ d_k) + \\ & + I_{1G}^- (\gamma_k^* d_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k d_k b_{-k}). \end{aligned} \quad (31)$$

При записи этого выражения были введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} E_a &= -J_0 S \cos(\theta_F - \theta_G) + h \cos \theta_F - \\ &\quad - I_0 (s_{11}^z \cos \theta_F + s_{11}^x \sin \theta_F), \\ E_b &= -J_0 S \cos(\theta_G - \theta_F) + h \cos \theta_G - \\ &\quad - I_0 (s_{11}^z \cos \theta_G + s_{11}^x \sin \theta_G), \\ E_c &= \epsilon_0 - \epsilon_1, & E_d &= \epsilon_{\bar{1}} - \epsilon_1, \\ J_{\pm} &= \frac{J_0 S}{2} (\cos(\theta_F - \theta_G) \pm 1), \\ I_{nA}^{\pm} &= I_0 \sqrt{\frac{S}{2}} \left(s_{n1}^x \cos \theta_A - s_{n1}^z \sin \theta_A \pm \frac{s_{n1}^y}{i} \right), \\ n &= \{0, \bar{1}\}, & A &= \{F, G\}, \\ \gamma_k &= \frac{1}{3} \sum_{\delta} e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos \frac{k_z}{2} e^{i \frac{k_x}{2\sqrt{3}}} + e^{-i \frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right). \end{aligned} \quad (32)$$

В сумме, определяющей инвариант треугольной решетки γ_k , вектор δ пробегает три значения: $\{\xi, -\zeta, \zeta - \xi\}$ (см. рис. 1). Зона Бриллюэна, ограничивающая область значений квазиимпульса k , представлена на рис. 3.

Для получения дисперсионного уравнения определим матричную запаздывающую функцию Грина $\langle\langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle\rangle_{\omega}$, где

$$\mathbf{X}_k^+ = (a_k^+, b_k^+, c_k^+, d_k^+, a_{-k}, b_{-k}, c_{-k}, d_{-k}).$$

Из требования существования нетривиальных решений уравнения движения для $\langle\langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle\rangle_{\omega}$ следует уравнение для спектра

$$\begin{vmatrix} \omega - \mathbf{A}_k & -\mathbf{B}_k \\ \mathbf{B}_k & \omega + \mathbf{A}_k \end{vmatrix} = 0, \quad (33)$$

где

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} E_a & J_+ \gamma_k & I_{0F}^+ \gamma_k^* & I_{1F}^+ \gamma_k^* \\ J_+ \gamma_k^* & E_b & I_{0G}^+ \gamma_k & I_{1G}^+ \gamma_k \\ I_{0F}^+ \gamma_k^* & I_{0G}^+ \gamma_k^* & E_c & 0 \\ I_{1F}^+ \gamma_k^* & I_{1G}^+ \gamma_k^* & 0 & E_d \end{pmatrix} \quad (34)$$

и

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 0 & J_- \gamma_k & I_{0F}^- \gamma_k^* & I_{1F}^- \gamma_k^* \\ J_- \gamma_k^* & 0 & I_{0G}^- \gamma_k & I_{1G}^- \gamma_k \\ I_{0F}^- \gamma_k^* & I_{0G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \\ I_{1F}^- \gamma_k^* & I_{1G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Дисперсионное уравнение (33) является уравнением четвертой степени относительно ω^2 , а его решения ε_{jk} ($j = 1, \dots, 4$) представляют четыре ветви коллективных спиновых возбуждений рассматриваемого SU3F.

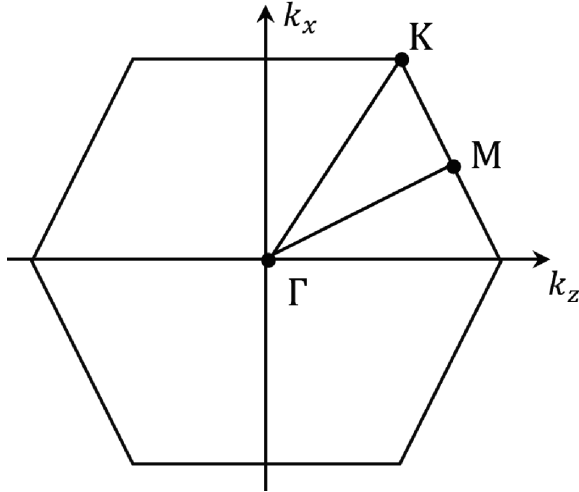


Рис. 3. Зона Бриллюэна треугольной решетки и три точки высокой симметрии: Γ , K , M

7. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА $SU(3)F$ ПРИ $I < J$

Обсуждение фазовой диаграммы $SU(3)F$ в координатах магнитное поле — параметр ОА проведем отдельно для трех вариантов соотношений между обменными параметрами: $I < J$, $I > J$, $I = J$. В данном разделе мы рассмотрим первый вариант: $I < J$.

На рис. 4 изображена фазовая диаграмма основного состояния $SU(3)F$, рассчитанная согласно методике, изложенной в разд. 5, при соотношении обменных параметров $I/J = 0.8$. Видно, что в рассматриваемом режиме реализуются три фазы: перевернутая Y -фаза (обозначаемая далее как \bar{Y}), W -фаза и ферромагнитная фаза.

В \bar{Y} -фазе вектор среднего значения спина L -подрешетки \mathbf{R}_L направлен вдоль направления магнитного поля (оси z), а векторы средних значений спинов F - и G -подрешеток \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G составляют с осью z одинаковые по модулю, но противоположные по знаку углы: $\theta_F = -\theta_G$. При этом модуль углов θ_F и θ_G изменяется в интервале $[\pi/2, \pi]$. В симметричной W -фазе углы θ_F и θ_G также равны по модулю и противоположны по знаку, однако, в отличие от \bar{Y} -фазы, интервал изменения модулей этих углов другой: $[0, \pi/2]$. В этом случае проекции всех трех векторов \mathbf{R}_F , \mathbf{R}_G и \mathbf{R}_L на ось x положительны. Граница раздела \bar{Y} - и W -фаз на рис. 4 обозначена штриховой линией. Справа от красной линии на фазовой диаграмме реализуется ферромагнитная фаза: векторы средних значений спинов из L -, F - и G -подрешеток направлены вдоль магнитного поля.

Эволюция магнитной структуры при $I < J$ характеризуется монотонным уменьшением абсолют-

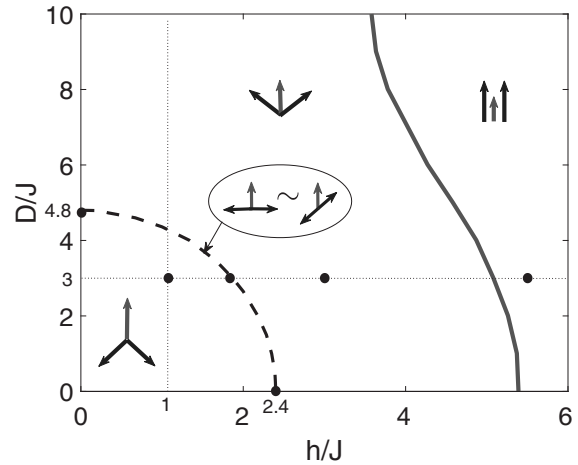


Рис. 4. Фазовая h - D -диаграмма основного состояния $SU(3)F$ при $I/J = 0.8$. Черная штриховая линия отвечает границе между \bar{Y} - и W -фазами, а сплошная красная — между W -фазой и ферромагнитной. На пиктограммах, условно изображающих магнитную структуру $SU(3)F$, красная стрелка символизирует вектор \mathbf{R}_L , синие стрелки — $\mathbf{R}_{F(G)}$, а магнитное поле h считается направленным вверх. На штриховой линии реализуется фаза, в которой подсистемы со спинами $S = 1$ и $1/2$ становятся эффективно независимыми

ных значений углов θ_F и θ_G с увеличением H и обращением их в нуль при некотором значении поля, зависящем от параметра ОА (см. красную линию на рис. 4). Сказанное поясняется тремя пиктограммами, условно изображающими магнитную структуру в каждой из трех областей фазовой диаграммы.

Для понимания представленной фазовой диаграммы рассчитаем зависимости параметров порядка $SU(3)F$ от магнитного поля при фиксированном значении параметра ОА и от параметра ОА при фиксированном h .

Средние значения спинов R_F и R_G в F - и G -подрешетках можно рассчитать, воспользовавшись представлением Гольштейна–Примакова (8), согласно которому

$$\begin{aligned} R_F &= \langle S_f^{z'} \rangle = S - n_a, \\ R_G &= \langle S_g^{z''} \rangle = S - n_b, \end{aligned} \quad (36)$$

где числа заполнения бозонов $n_a = \langle a_f^+ a_f \rangle$ и $n_b = \langle b_g^+ b_g \rangle$ вычисляются по спектральной теореме из матричной функции Грина $\langle \langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle \rangle_\omega$, введенной в разд. 6.

Средний спиновый магнитный момент L -подрешетки R_L можно найти по формуле

$$R_L = \sqrt{(R_L^z)^2 + (R_L^x)^2}, \quad (37)$$

где величины R_L^z и R_L^x определяются средними числами заполнения c - и d -бозонов: $n_c = \langle c_k^\dagger c_k \rangle$ и $n_d = \langle d_k^\dagger d_k \rangle$, а также корреляторами $\langle c_k^\dagger d_k \rangle$ и $\langle d_k^\dagger c_k \rangle$. Соответствующие выражения получаются в результате усреднения формул, приведенных в Приложении С. Поскольку суммарный магнитный момент $\mathbf{M} = \mathbf{R}_F + \mathbf{R}_G + \mathbf{R}_L$ направлен вдоль внешнего магнитного поля (т. е. оси z), то его поперечная компонента должна обращаться в нуль тождественно

$$R_L^x + R_F \sin \theta_F + R_G \sin \theta_G = 0,$$

а продольная компонента равна

$$M = R_L^z + R_F \cos \theta_F + R_G \cos \theta_G. \quad (38)$$

Среднее значение квадрупольного момента [42]

$$Q_2^0(l) = 3(S_l^y)^2 - 2 \quad (39)$$

рассчитывается аналогичным образом после усреднения соответствующих формул из Приложения С.

Графики, демонстрирующие зависимость полного момента M , средних значений спиновых магнитных моментов R_L , $R_{F(G)}$ и квадрупольного момента Q_2^0 от внешнего поля h при значении параметра ОА $D/J = 3$ и соотношении между обменными интегралами I/J , равном 0.8, представлены на рис. 5. Изменению магнитного поля на этом рисунке отвечает движение по горизонтальной пунктирной линии на фазовой диаграмме рис. 4. Видно, что в точке перехода из W -фазы в ферромагнитную все кривые на рис. 5 испытывают излом. При этом значения M и R_L ожидаемо увеличиваются при увеличении поля h , а квадрупольный момент — уменьшается.

Зависимости параметров порядка M , R_L , R_F , R_G и Q_2^0 от параметра D при значении магнитного поля $h/J = 1$ представлены на рис. 6. Изменению параметра D на этом рисунке отвечает движение по вертикальной пунктирной линии на фазовой диаграмме рис. 4. Видно, что при пересечении границы \bar{Y} - и W -фаз зависимости параметров $R_{F(G)}$ от D испытывают излом, а квадрупольный момент выходит на насыщение. Среднее значение момента L -подрешетки быстро уменьшается в окрестности границы, но при дальнейшем увеличении D спадает медленно. Очевидно, что именно уменьшение R_L способствует развороту вверх векторов $\mathbf{R}_{F(G)}$, поскольку уменьшает проигрыш в обменной энергии между спинами $S = 1$ и $S = 1/2$.

Важной особенностью фазовой диаграммы, представленной на рис. 4, является то, что на всей

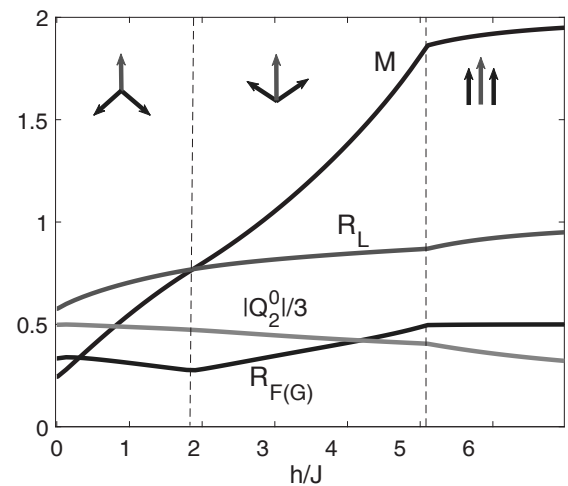


Рис. 5. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зеленая линия) от магнитного поля h . Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $D/J = 3$. Три пиктограммы, составленные из одной красной и двух синих стрелок, имеют тот же смысл, что и на рис. 4

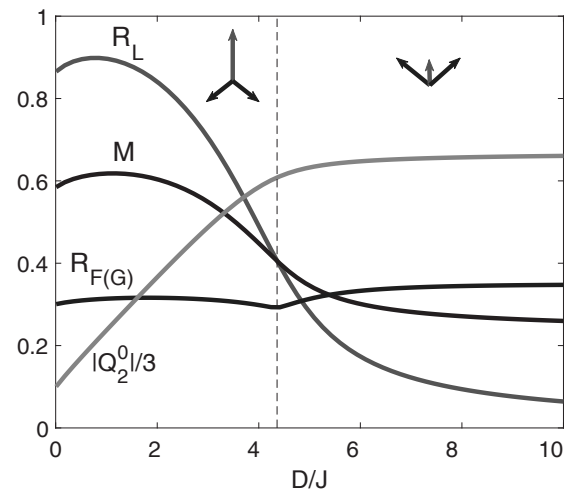


Рис. 6. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зеленая линия) от параметра ОА D . Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $h/J = 1$

границе между \bar{Y} - и W -фазами (черная штриховая линия) угол между векторами \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G равен π . В этом случае из выражений (12) для эффективных полей находим

$$\bar{H}_z = -h_L, \quad \bar{H}_x = 0. \quad (40)$$

При учете этих соотношений и при условии $h_L \neq 0$ решения уравнений (24) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$) получаются в виде

$$\operatorname{tg} 2\alpha_1 = \frac{D}{2h_L}(-1)^{n+m}, \quad \alpha_2 = \pi n, \quad \alpha_3 = \pi m, \quad (41)$$

где n и m — целые числа. Подстановка этих решений в выражения для матричных элементов спиновых операторов из приложения В дает

$$s_{11}^z = \cos 2\alpha_1, \quad s_{11}^x = 0. \quad (42)$$

Поскольку $s_{11}^x = 0$ и $\theta_F - \theta_G = \pi$, то из уравнений (25) для углов θ_F и θ_G находим условие

$$s_{11}^z = h/I_0, \quad (43)$$

которому должен удовлетворять элемент s_{11}^z на границе раздела \bar{Y} - и W -фаз. Уравнение, описывающее границу этих фаз, нетрудно получить из условия совместности трех уравнений для угла α_1 и матричный элемент s_{11}^z в формулах (41), (42) и (43). В результате получается следующая связь между параметрами модели и магнитным полем:

$$D = \frac{2g_L}{g} \sqrt{I_0^2 - h^2}. \quad (44)$$

Это выражение описывает аналитически штриховую линию на рис. 4.

Важно отметить, что в точках фазовой диаграммы, лежащих на этой штриховой линии, ориентация (антипараллельных) векторов \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G относительно оси z не фиксирована. Последнее обстоятельство означает вырождение основного состояния $SU3F$ относительно одновременного вращения спинов из F - и G -подрешеток вокруг оси y при условии, что векторы \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G остаются антипараллельными.

Действительно, подставляя решения (41) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$) в формулы (22) и (23), а также фиксируя в выражении (10) разницу в π между углами θ_F и θ_G , получаем

$$\epsilon_1 = D/2 - \sqrt{h_L^2 + (D/2)^2}, \quad E_0 = -J_0 S^2 N.$$

Следовательно, в точках фазовой диаграммы, лежащих строго на границе \bar{Y} - и W -фаз (т. е. на штриховой линии на рис. 4), энергия основного состояния $E_{MF} = E_0 + N\epsilon_1$ (см. (26)) не зависит от углов θ_F и θ_G .

Физическая причина такого поведения обусловлена тем, что при $\theta_F - \theta_G = \pi$ два эффективных поля, действующих на спины из L -подрешетки со стороны F - и G -подсистем, компенсируют друг друга

(см. формулу (12)). В результате L -подрешетка перестает «чувствовать» как F -, так и G -подсистемы. При этом внешнее магнитное поле h_L продолжает действовать на L -подсистему, ориентируя вектор \mathbf{R}_L вдоль направления \mathbf{h}_L .

Одновременно с этим F - и G -подрешетки перестают «чувствовать» L -подсистему, поскольку создаваемые ею эффективные поля в F - и G -подрешетках полностью компенсируются внешним магнитным полем h . Действительно, как следует, например, из выражения (7), величины E_a и E_b (см. обозначения (32)) являются теми самыми эффективными полями, которые действуют на спины соответственно из F - и G -подрешеток. Поскольку в точках, лежащих на штриховой линии фазовой диаграммы рис. 4, выполняются соотношения (42) и (43), то указанные выше вклады в эффективные поля E_a и E_b от L -подсистемы ($-I_0 s_{11}^z \cos \theta_{F(G)}$) и от внешнего магнитного поля ($h \cos \theta_{F(G)}$) взаимно сокращаются.

Таким образом, в точках, принадлежащих пунктирной линии на фазовой диаграмме на рис. 4, $SU3F$ распадается на две эффективно невзаимодействующие подсистемы, одна из которых образована из спинов $S = 1$ (L -подрешетка), а вторая — из спинов $S = 1/2$ (F - и G -подрешетки). При этом спины с $S = 1$ ведут себя как парамагнетик во внешнем магнитном поле, поскольку они продолжают испытывать действие поля h_L , а взаимодействие между ними отсутствует. Спины $S = 1/2$ ведут себя как двухподрешеточный (F и G) коллинеарный антиферромагнетик в эффективном нулевом магнитном поле. Последнее обстоятельство, допускающее произвольную ориентацию вектора антиферромагнетизма в плоскости zx , обуславливает дополнительное вырождение основного состояния.

8. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА $SU3F$ ПРИ $I/J > 1$

При $I > J$ фазовая диаграмма $SU3F$ в магнитном поле качественно меняется. На рис. 7 представлена фазовая диаграмма, рассчитанная при соотношении обменных параметров $I/J = 1.2$. Видно, что в этом случае реализуются четыре магнитные фазы: Y -фаза, коллинеарная ферримагнитная фаза, $V(\bar{V})$ -фаза, ферромагнитная фаза.

В Y -фазе вектор \mathbf{R}_L среднего значения спина в L -подрешетке (красная стрелка на пиктограммах рис. 7) направлен против магнитного поля (оси z), а векторы \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G среднего спина в F -

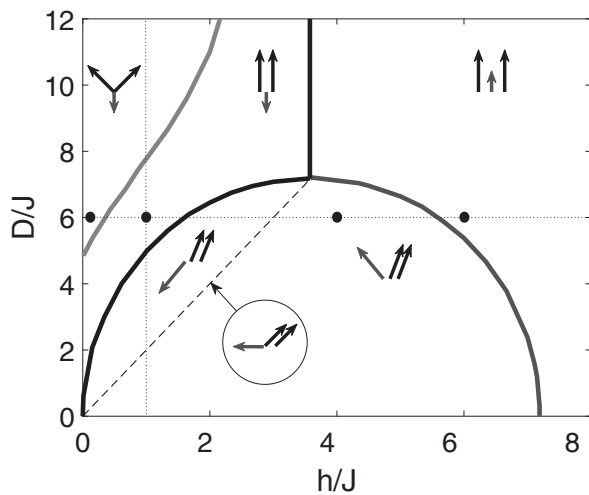


Рис. 7. Фазовая диаграмма основного состояния SU3F при $I/J = 1.2$. Зеленая линия обозначает границу раздела между Y -фазой и коллинеарной ферримагнитной фазой, синяя линия — между коллинеарной ферримагнитной и \bar{V} -фазой, черная линия — между ферромагнитной и коллинеарной ферримагнитной фазами, красная линия — между ферромагнитной и V -фазами, штриховая линия — между \bar{V} - и V -фазами (на этой линии $\theta_L = -\pi/2$)

и G -подрешетках (синие стрелки) составляют одинаковые по модулю, но противоположные по знаку углы с осью z : $\theta_F = -\theta_G$. При этом $|\theta_{F(G)}| \in [0, \pi/2]$.

При переходе из Y -фазы в коллинеарную ферримагнитную углы θ_F и θ_G одновременно обращаются в нуль и все три вектора \mathbf{R}_F , \mathbf{R}_G и \mathbf{R}_L оказываются коллинеарны: первые два направлены по полю, а третий — против.

В области под синей и красной кривыми на рис. 7 реализуется так называемая V -фаза, в которой вектор \mathbf{R}_L составляет с осью z ненулевой угол θ_L , а векторы \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G — равные друг другу углы θ_F и θ_G . Последние принимают значения в интервале $(0, \pi/2)$. Данную область можно разделить прямой линией (штриховой на рис. 7) на две подобласти. Справа от этой линии угол $|\theta_L| < \pi/2$, а слева угол $|\theta_L| > \pi/2$. За первой областью оставим обозначение V -фаза, а вторую, чтобы отличать от первой, обозначим \bar{V} -фазой. Во всех точках штриховой линии угол θ_L строго равен $\pi/2$.

В ферромагнитной фазе все три вектора \mathbf{R}_F , \mathbf{R}_G и \mathbf{R}_L ориентированы вдоль магнитного поля.

Как и в предыдущем разделе, для понимания магнитной структуры рассмотрим изменения параметров порядка при движении по двум направлениям на фазовой диаграмме: вдоль горизонталь-

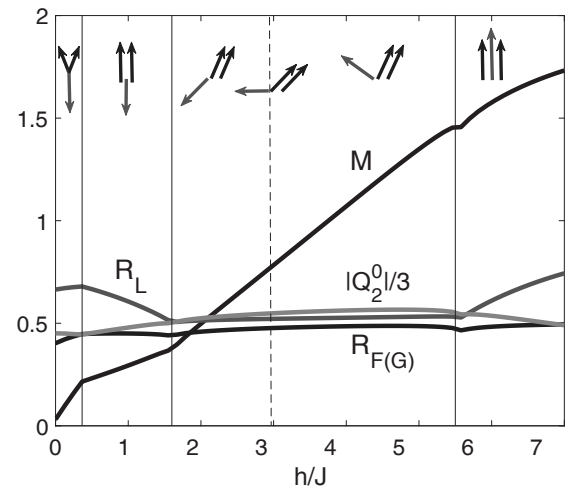


Рис. 8. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|$ (зеленая линия) от напряженности внешнего магнитного поля h при $I/J = 1.2$ и $D/J = 6$

ной пунктирной линии при фиксированном значении $D/J = 6$ и вдоль вертикальной пунктирной линии при значении поля $h/J = 1$ (см. рис. 7).

На рис. 8 представлены зависимости величин R_L , $R_{F(G)}$, M и Q_2^0 от внешнего магнитного поля h при $D/J = 6$. Это отвечает движению по горизонтальной пунктирной линии на рис. 7. Видно, что изменения $R_{F(G)}$ и Q_2^0 при увеличении поля h на указанном интервале незначительны, причем сокращение среднего значения спина $R_{F(G)}$ из-за АФ невелико. Средний момент L -подрешетки, напротив, подавлен существенно как за счет АФ, так и ОА. В ферримагнитной фазе вектор \mathbf{R}_L направлен против поля, и величина R_L ожидаемо уменьшается с увеличением h . В ферромагнитной фазе вектор \mathbf{R}_L направлен по полю, и величина R_L — увеличивается.

Важный факт, который демонстрируют графики на рис. 8, состоит в том, что эволюция магнитной структуры происходит в той же последовательности, что и для антиферромагнетика на треугольной решетке (АФМТР) с $S = 1/2$, но без ОА [38, 43]. При этом если в АФМТР существование протяженной ферримагнитной (или *uud*) фазы может быть описано только при учете квантовых флуктуаций (снимающих случайное вырождение), то в SU3F эта фаза возникает исключительно за счет ОА. Кроме того, поведение полного момента M качественно воспроизводит основные этапы эволюции M в АФМТР: монотонное возрастание M в Y -, \bar{V} - и V -фазах; поло-

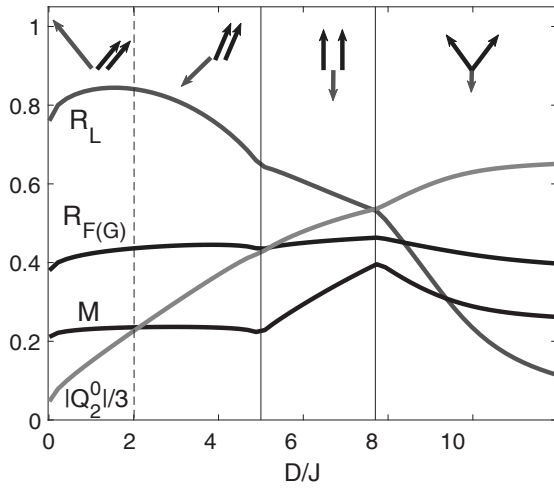


Рис. 9. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|$ (зеленая линия) от параметра D для $I/J = 1.2$ и при $h/J = 1$

гий участок в феррииманетной (uud) фазе (то, что в АФМТР принято называть $1/3$ -плато намагниченности); и область насыщения M в ферромагнитной фазе которое, однако, вследствие учета ОА слабо выражено.

Отметим также, что при увеличении параметра ОА интервал существования \bar{V} - и V -фаз на рис. 8 сжимается и, как следует из фазовой диаграммы на рис. 7, при $D/J \gtrsim 7$ этот интервал схлопывается в точку.

На рис. 9 представлена зависимость величин R_L , $R_{F(G)}$, M и $|Q_2^0|$ от параметра анизотропии D при $I/J = 1.2$ и величине магнитного поля $h/J = 1$. Эти зависимости строятся при движении вдоль вертикальной пунктирной линии на рис. 7. Видно, что квадрупольный момент при увеличении h ожидаемо возрастает, в то время как спиновый момент R_L из L -подрешетки после небольшого увеличения в области малых полей далее монотонно уменьшается. Спиновые моменты $R_{F(G)}$ из F - и G -подрешеток не меняют существенно своих значений на всем интервале изменения D . Поэтому заметное увеличение полного момента M в феррииманетной фазе связано не с изменением ориентации моментов или абсолютных значений $R_{F(G)}$, а именно с уменьшением величины R_L за счет ОА. При переходе в Y -фазу полный момент M начинает уменьшаться, поскольку поворот векторов \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G вокруг оси y уменьшает их проекцию на ось z .

Три вертикальные линии на рис. 9 разделяют четыре описанные выше фазы. При переходе из V -фазы в феррииманетную и из феррииманетной в Y -фазу все зависимости параметров порядка испытывают излом. В то же время переход из V -фазы в \bar{V} -фазу не сопровождается никакими аномалиями в представленных зависимостях.

9. ВЫРОЖДЕНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ $I = J$

Случай $I = J$ является особым, поскольку классический аналог гамильтониана $SU(3)$, как мы сейчас покажем, имеет непрерывное случайное вырождение.

Действительно, определим зависящий от параметра λ гамильтониан:

$$\mathcal{H}_\lambda = J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g + \lambda J \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_l + \lambda J \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \mathbf{S}_l + D \sum_l (S_l^y)^2 - \mathbf{h} \left(\sum_f \mathbf{S}_f + \sum_g \mathbf{S}_g + \lambda \sum_l \mathbf{S}_l \right), \quad (45)$$

где направление магнитного поля $\mathbf{h} = g\mu_B \mathbf{H}$ в общем случае произвольно. Все обозначения в формуле (45) такие же, как и в гамильтониане (1). Видно, что если для λ удовлетворяются сразу два условия: $\lambda = I/J = g_L/g$ и поле \mathbf{h} направлено вдоль оси z , то гамильтониан (45) совпадает с оператором \mathcal{H} , определенным формулой (1).

С другой стороны, нетрудно проверить, что гамильтониан (45) с точностью до константы

$$-JN \left(\frac{3}{2} \lambda^2 S_L (S_L + 1) + \frac{9}{4} + \frac{h^2}{6J^2} \right), \quad S_L = 1, \quad (46)$$

может быть представлен в виде

$$\mathcal{H}_\lambda = D \sum_l (S_l^y)^2 + \frac{J}{4} \sum_p \left(\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda \mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J} \right)^2, \quad (47)$$

где сумма по p обозначает суммирование по треугольным плакетам, а нижние индексы F , G и L у спиновых операторов указывают на их принадлежность к соответствующей подрешетке в p -ом плакете.

Таким образом, если для параметров $SU(3)$ выполняется соотношение

$$\frac{I}{J} = \frac{g_L}{g}, \quad (48)$$

то гамильтониан $SU(3)_F$ в выражении (1) может быть представлен в виде (47) с \mathbf{h} , направленным вдоль оси z .

Если теперь вместо операторов спина в (47) рассмотреть классические моменты, т. е. обычные векторы фиксированной длины, то, как нетрудно заметить, минимальное значение гамильтониана (47) будет достигаться при равенстве нулю обоих его слагаемых. Обращение в нуль первого слагаемого означает, что спины L -подрешетки лежат в плоскости легкого намагничивания zx . Требование обращения в нуль второго слагаемого в (47) сводится к уравнению

$$\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda \mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J} = 0. \quad (49)$$

Очевидно, что в определенном интервале значений магнитных полей h это уравнение может быть удовлетворено бесконечным множеством решений, т. е. ориентаций трех векторов \mathbf{R}_L , \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G , даже в том случае, когда поле \mathbf{h} не лежит в плоскости zx . Кроме того, если направление магнитного поля параллельно плоскости zx (как в рассматриваемом нами случае), то ориентация векторов \mathbf{R}_L , \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G , реализующая минимум гамильтониана (47), может и не быть компланарна с плоскостью zx .

Проведенный анализ классического предела гамильтониана (47) позволяет предположить, что отмеченное (непрерывное) вырождение основного состояния $SU(3)_F$ будет иметь место и в квантовом случае при выполнении соотношения (48). Выполненные нами расчеты в приближении среднего поля при $I = J$ и $g_L = g$ показали, что это действительно так.

Аналогичное рассмотренному вырождение имеет место и в других квантовых магнетиках, например, в АФМТР с $S = 1/2$ [43]. Как было впервые показано в работе [38], указанное вырождение может быть снято при учете нулевых квантовых колебаний. Такой подход требует учета более высоких порядков (по сравнению с гармоническим приближением, использованным в данной работе) при бозонизации спиновых операторов в рамках представления Гольштейна – Примакова для F - и G -подсистем и в формализме индефинитной метрики для L -подсистемы.

По этой причине построение фазовой диаграммы $SU(3)_F$ при критических параметрах, удовлетворяющих соотношению (48), будет проведено авторами в рамках отдельного исследования.

10. СПИН-ВОЛНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В $SU(3)_F$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Спектральные свойства $SU(3)_F$ в нулевом магнитном поле были подробно исследованы в работе авторов [31]. В данном разделе мы проведем анализ изменений спектра в ненулевом магнитном поле при фиксированном значении параметра ОА. Четыре дисперсионные кривые ε_{jk} ($j = 1, \dots, 4$) рассчитывались для каждого набора параметров модели на основе уравнения (33), полученного в разд. 6.

На рис. 10 представлены результаты численных расчетов дисперсионных кривых для четырех значений магнитного поля при параметрах модели $I/J = 0.8$ и $D/J = 3$. На фазовой диаграмме на рис. 4 указанным четырем значениям поля h отвечают четыре черные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной прямой. Видно, что при $h/J = 1$ реализуется \bar{Y} -фаза; при $h/J = 1.87$ — антипараллельная фаза для F - и G -подрешеток; при $h/J = 3$ — W -фаза; и при $h/J = 5.5$ — ферромагнитная фаза. На каждом из четырех графиков рис. 10 имеются четыре дисперсионные кривые в соответствии с четырьмя типами введенных бозонов. Но только в отношении одной кривой (черной на всех графиках) можно утверждать, что ее природа почти полностью определяется высокоэнергетическими d -бозонами; остальные три ветви в той или иной степени формируются с учетом гибридизации состояний a -, b - и c -бозонов.

Важное наблюдение состоит в том, что на трех первых графиках, a , b и c , имеется как минимум одна голдстоуновская мода (синие кривые), связанная с нарушением симметрии основного состояния относительно вращения спинов F - и G -подрешеток на один и тот же угол относительно направления магнитного поля. В ферромагнитной фазе (рис. 10 d) основное состояние не нарушает указанную симметрию и соответственно голдстоуновская (безщелевая) мода отсутствует.

Кроме того, на рис. 10 b голдстоуновских мод две (совпадающие синяя и красная кривые). Происхождение второй моды связано с обсуждавшейся в конце разд. 7 особенностью точек фазовой диаграммы, лежащих на штриховой кривой (см. рис. 4). В этом случае моменты \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G лежат в плоскости zx вдоль одной линии и противоположно направлены, а энергия системы оказывается вырождена относительно вращения линии векторов \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G вокруг оси y .

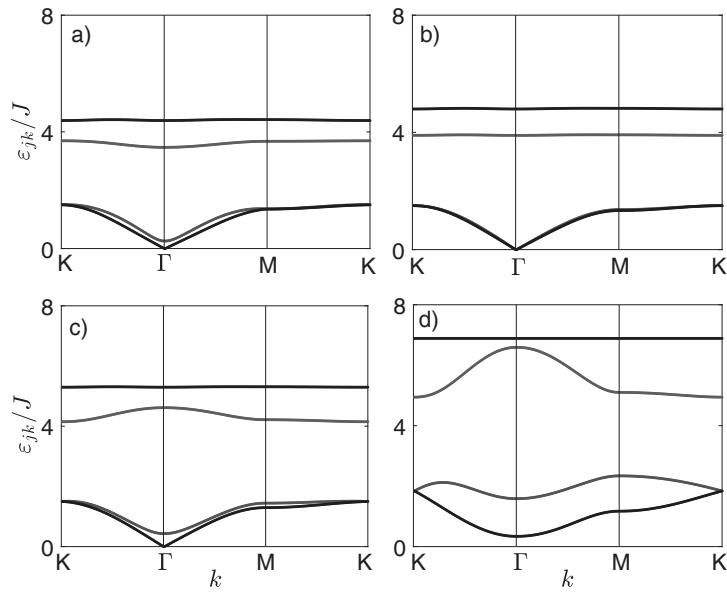


Рис. 10. Спектры спин-волновых возбуждений при $I/J = 0.8$, $D/J = 3$ и при четырех значениях напряженности внешнего магнитного поля: $h/J = 1$ (a), 1.87 (b), 3 (c), 5.5 (d). Вектор k пробегает по треугольнику $\Gamma K M$ в зоне Бриллюэна (см. рис. 3)

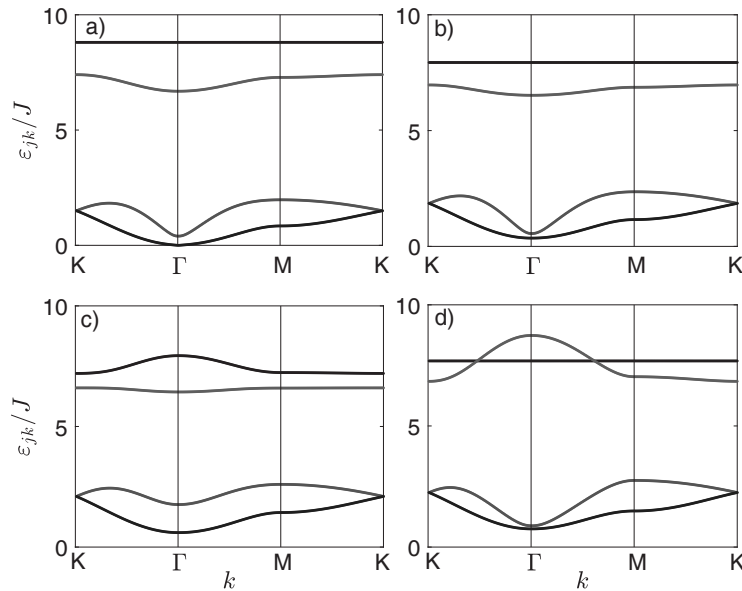


Рис. 11. Спектры спин-волновых возбуждений при $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ и при четырех значениях напряженности внешнего магнитного поля: $h/J = 0.3$ (a), 1 (b), 4 (c), 6 (d). Вектор k пробегает по треугольнику $\Gamma K M$ в зоне Бриллюэна (см. рис. 3)

Как отмечалось в разд. 7, такое поведение связано с обращением эффективных полей в нуль и фактической независимостью L -подсистемы от F - и G -подсистем. В такой ситуации узлы L -подрешетки оказываются эффективно изолированными (в том числе друг от друга), чем, в частности, и объясняется бездисперсность двух высокоэнергетических ветвей (черной и коричневой) на рис. 10 b .

На рис. 11 представлены графики дисперсионных зависимостей ε_{jk} , рассчитанные при следующих параметрах модели: $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ для четырех значений внешнего магнитного поля: $h/J = 0.3, 1, 4$ и 6 . На фазовой диаграмме на рис. 7 указанным четырем значениям поля h отвечают четыре черные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной прямой. При увеличении магнитного поля h в указанных точках фазовой диаграммы последовательно реализуются четыре фазы: \bar{Y} -фаза при $h/J = 0.3$; ферримагнитная — при $h/J = 1$; V -фаза при $h/J = 4.3$; ферромагнитная — при $h/J = 6$.

Из графиков, представленных на рис. 11 следует, что голдстоуновская мода реализуется только в первом случае (рис. 11 a), поскольку нарушение симметрии основного состояния (относительно вращений вокруг оси z) имеет место только в \bar{Y} -фазе. Во всех других областях фазовой диаграммы на рис. 7 спектр возбуждения спиновых волн всегда щелевой.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главным итогом проведенного исследования является построение фазовой диаграммы $SU(3)$ -ферримагнетика на треугольной решетке в координатах магнитное поле h (лежащее в плоскости легкого намагничивания)–параметр одноионной анизотропии D при нулевой температуре. Среди характерных особенностей модели рассмотренного $SU(3F)$ выделим следующие три: 1) разная величина спина в магнитных подрешетках — в двух подрешетках (F и G) спины $S = 1/2$, в третьей L -подрешетке $S = 1$; 2) наличие одноионной анизотропии типа легкая плоскость на узлах L -подрешетки со спинами $S = 1$; 3) разные значения обменных интегралов между спинами из F - и G -подрешеток (J) и между спинами из L - и $F(G)$ -подрешеток (I).

Результаты численных расчетов в приближении среднего поля показали, что в зависимости от соотношения между обменными интегралами I и J имеются два типа фазовой диаграммы $SU(3F)$, качествен-

но различающихся как по количеству реализующихся фаз, так и по типу их магнитной структуры.

При $I < J$ основное состояние $SU(3F)$ в разных областях фазовой диаграммы может быть охарактеризовано тремя магнитными конфигурациями: \bar{Y} , W и ферромагнитной (см. рис. 4). При этом в точках, лежащих на границе между \bar{Y} - и W -фазами (штриховая линия на рис. 4), реализуются состояния, в которых $SU(3F)$ можно представить в виде двух не связанных между собой магнитных подсистем. Одна из этих подсистем состоит из спинов $S = 1$ на треугольной решетке и ведет себя как парамагнетик. Вторая подсистема состоит из спинов $S = 1/2$, образующих плоскую гексагональную решетку и находящихся в фазе двухподрешеточного коллинеарного антиферромагнетика в эффективном нулевом магнитном поле. Последнее обстоятельство приводит к дополнительному вырождению основного состояния относительно вращения вектора антиферромагнетизма в плоскости легкого намагничивания и проявляется в виде дополнительной голдстоуновской моды в спектре спин-волновых возбуждений.

При обратном соотношении между обменными интегралами ($I > J$) фазовая h - D -диаграмма $SU(3F)$ качественно модифицируется. Теперь на ней можно выделить уже четыре области, различающиеся типом магнитной структуры основного состояния, а именно: Y -фазу, две коллинеарные ферри- и ферромагнитные фазы и V -фазу. При этом последнюю можно разделить еще на две фазы \bar{V} и V в зависимости от того, превышает угол θ_L величину $\pi/2$ или нет.

Для случаев $I < J$ и $I > J$ проанализированы зависимости квадрупольного и дипольных параметров порядка как от магнитного поля при фиксированном значении ОА, так и от параметра ОА при фиксированном значении h . Важным результатом этой части исследования следует считать зависимость полного момента M от внешнего магнитного поля, которая при $I > J$ и определенном конечном значении параметра ОА качественно воспроизводит аналогичную зависимость, наблюдаемую в хорошо известных квантовых антиферромагнетиках на треугольной решетке с одинаковым значением спина $S = 1/2$ для всех подрешеток и без ОА [38, 43]. В частности, на определенном интервале магнитного поля в зависимости $M(h)$ имеется плато намагниченности (имеющее, однако, в нашем случае небольшой наклон), которое в АФМТР возникает за счет квантовых антиферромагнитных флуктуаций, а в $SU(3F)$ за счет ОА.

Важно отметить, что качественное различие двух фазовых диаграмм при $I < J$ и при $I > J$ таково, что при $I \rightarrow J$ непрерывная трансформация одной диаграммы в другую не имеет места. Дело в том, что при равенстве обменных интегралов ($I = J$) возникает случайное вырождение, приводящее при среднеполевом рассмотрении к неопределенности магнитной конфигурации при заданных значениях магнитного поля и ОА. Наше предположение состоит в том, что, как и в случае АФМТР, учет квантовых флуктуаций должен снять отмеченное случайное вырождение (как, возможно, и отмечавшееся выше дополнительное вырождение при $I < J$). Однако эта задача является предметом отдельного исследования.

Завершая обсуждение полученных в работе результатов, еще раз отметим, что в рассмотренном нами случае магнитное поле \mathbf{h} , приложенное к квантовому $SU(3)F$, ориентировано в плоскости легкого намагничивания. При ориентации магнитного поля вдоль нормали к этой плоскости поведение параметров порядка квантового магнетика может быть качественно иным.

Благодарности. Авторы выражают благодарность профессору В.В. Валькову за помощь в постановке задачи исследования, полезные советы и стимулирующее обсуждение полученных результатов.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках научной тематики госзадания ИФ СО РАН.

ПРИЛОЖЕНИЕ А. УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ОПЕРАТОРОВ ХАББАРДА

В результате унитарных преобразований операторов Хаббарда по формуле (20) с унитарным оператором $U_{\tilde{n}\tilde{m}}(\alpha)$ ($n \neq m$), определенным формулой (17), получаются следующие выражения [40]:

$$\begin{aligned} X^{nn} &= \cos^2 \alpha X^{\tilde{n}\tilde{n}} + \sin^2 \alpha X^{\tilde{m}\tilde{m}} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sin 2\alpha (X^{\tilde{n}\tilde{m}} + X^{\tilde{m}\tilde{n}}), \\ X^{mm} &= \cos^2 \alpha X^{\tilde{n}\tilde{n}} + \sin^2 \alpha X^{\tilde{m}\tilde{m}} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin 2\alpha (X^{\tilde{n}\tilde{m}} + X^{\tilde{m}\tilde{n}}), \\ X^{nm} &= \cos^2 \alpha X^{\tilde{n}\tilde{m}} - \sin^2 \alpha X^{\tilde{m}\tilde{n}} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin 2\alpha (X^{\tilde{n}\tilde{n}} - X^{\tilde{m}\tilde{m}}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X^{mn} &= \cos^2 \alpha X^{\tilde{m}\tilde{n}} - \sin^2 \alpha X^{\tilde{n}\tilde{m}} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin 2\alpha (X^{\tilde{n}\tilde{n}} - X^{\tilde{m}\tilde{m}}), \\ X^{np} &= \cos \alpha X^{\tilde{n}\tilde{p}} - \sin \alpha X^{\tilde{m}\tilde{p}}, \\ X^{pn} &= \cos \alpha X^{\tilde{p}\tilde{n}} - \sin \alpha X^{\tilde{p}\tilde{m}}, \\ X^{pm} &= \cos \alpha X^{\tilde{p}\tilde{m}} + \sin \alpha X^{\tilde{p}\tilde{n}}, \\ X^{mp} &= \cos \alpha X^{\tilde{m}\tilde{p}} + \sin \alpha X^{\tilde{n}\tilde{p}}, \\ X^{pq} &= X^{\tilde{p}\tilde{q}}, \end{aligned}$$

в которых все четыре индекса состояний p, q, n и m разные, а индексы узлов опущены. В основном тексте для индексов трехкратно преобразованных операторов Хаббарда знак тильды, обозначающий новые (преобразованные) состояния, для краткости не используется.

ПРИЛОЖЕНИЕ В. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СПИНОВЫХ ОПЕРАТОРОВ

В данном приложении представлен явный вид матричных элементов $s_{nm}^\alpha \equiv \langle n | S_l^\alpha | m \rangle$ ($\alpha = \{x, y, z\}$ и $n, m = \{\bar{1}, 0, 1\}$), использованных в разложении (27). Эти элементы получены в результате трех последовательных преобразований операторов Хаббарда с помощью трех унитарных операторов, $U_{1-1}(-\alpha_1)$, $U_{0-1}(-\alpha_3)$ и $U_{10}(-\alpha_2)$, и последующей подстановке результата преобразования в представление (15) для спиновых операторов L -подрешетки.

Матричные элементы в разложении для оператора S_l^z :

$$\begin{aligned} s_{11}^z &= (\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)^2 - \\ &\quad - \sin^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_3, \\ s_{\bar{1}\bar{1}}^z &= (\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 \sin \alpha_3 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2)^2 - \\ &\quad - \cos^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_3, \\ s_{00}^z &= \sin^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 - \sin^2 \alpha_3, \\ s_{10}^z = s_{01}^z &= -\frac{1}{2} \sin \alpha_1 (1 + \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_3 - \\ &\quad - \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \sin(2\alpha_2) \cos \alpha_3, \\ s_{10}^z = s_{01}^z &= -\frac{1}{2} \cos \alpha_1 (1 + \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_3 + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \sin(2\alpha_2) \cos \alpha_3, \end{aligned}$$

$$s_{11}^z = s_{1\bar{1}}^z = \frac{1}{2} \cos 2\alpha_1 \sin 2\alpha_2 \sin \alpha_3 + \\ + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 (\sin^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \cos^2 \alpha_3 - \cos^2 \alpha_2).$$

Для оператора S_l^x :

$$s_{11}^x = \sqrt{2} (\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 - \\ - \sin \alpha_1 \sin \alpha_3 \cos \alpha_2) (\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \\ + \sin \alpha_1 \sin \alpha_3 \sin \alpha_2 + \sin \alpha_1 \cos \alpha_3), \\ s_{1\bar{1}}^x = \sqrt{2} (\sin \alpha_1 \sin \alpha_2 + \\ + \cos \alpha_1 \sin \alpha_3 \cos \alpha_2) (\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 - \\ - \cos \alpha_1 \sin \alpha_3 \sin \alpha_2 - \cos \alpha_1 \cos \alpha_3), \\ s_{00}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2 \cos^2 \alpha_3), \\ s_{11}^x = \frac{\cos 2\alpha_1}{\sqrt{2}} (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3 \cos 2\alpha_2) - \\ - \frac{\sin 2\alpha_1}{2\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2 (1 + \sin^2 \alpha_3)), \\ s_{10}^x = \frac{\cos \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos 2\alpha_2 \cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3) + \\ + \frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_2 \sin 2\alpha_3), \\ s_{1\bar{0}}^x = -\frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos 2\alpha_2 \cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3) + \\ + \frac{\cos \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_2 \sin 2\alpha_3), \\ s_{11}^x = s_{1\bar{1}}^x, \quad s_{10}^x = s_{01}^x, \quad s_{1\bar{0}}^x = s_{0\bar{1}}^x.$$

Для оператора S_l^y :

$$s_{11}^y = s_{1\bar{1}}^y = s_{00}^y = 0, \\ s_{01}^y = \frac{i}{\sqrt{2}} (-\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + \\ + \cos \alpha_1 (\cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)), \\ s_{10}^y = \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \\ + \sin \alpha_1 (\cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)),$$

$$s_{11}^y = \frac{i}{\sqrt{2}} (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3),$$

$$s_{11}^y = -s_{1\bar{1}}^y, \quad s_{10}^y = -s_{01}^y, \quad s_{1\bar{0}}^y = -s_{0\bar{1}}^y.$$

Для оператора $(S_l^y)^2$:

$$\langle 1 | (S_l^y)^2 | 1 \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_1 \sin^2 \alpha_2 + \\ + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha_1 (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3) - \\ - \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3), \\ \langle \bar{1} | (S_l^y)^2 | \bar{1} \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha_1 \sin^2 \alpha_2 + \\ + \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_1 (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3) + \\ + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3), \\ \langle 0 | (S_l^y)^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} (\sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \\ + 1 + \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3), \\ \langle \bar{1} | (S_l^y)^2 | 1 \rangle = \frac{1}{4} (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \\ - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_1 - \\ - \frac{1}{2} \cos 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3), \\ \langle \bar{1} | (S_l^y)^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_3 - \sin \alpha_2 \cos \alpha_3) + \\ + \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \left(\sin \alpha_2 \cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_2 \sin(2\alpha_3) \right), \\ \langle 1 | (S_l^y)^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3) + \\ + \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \left(\sin \alpha_2 \cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_2 \sin(2\alpha_3) \right), \\ \langle 1 | (S_l^y)^2 | \bar{1} \rangle = \langle \bar{1} | (S_l^y)^2 | 1 \rangle, \quad \langle 0 | (S_l^y)^2 | \bar{1} \rangle = \langle \bar{1} | (S_l^y)^2 | 0 \rangle, \\ \langle 0 | (S_l^y)^2 | 1 \rangle = \langle 1 | (S_l^y)^2 | 0 \rangle.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ С. БОЗОНИЗАЦИЯ СПИНОВЫХ ОПЕРАТОРОВ ДЛЯ $S = 1$

Используя представление (28) в формулах (27) и оставляя только слагаемые не выше второго порядка по бозе-операторам, получаем следующее представление спиновых операторов через бозевские:

$$\begin{aligned}
S_l^x &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(s_{0,1}^x(c_l^+ + c_l) + s_{1,1}^x(d_l^+ + d_l) + \\
&+ s_{1,0}^x(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + s_{1,1}^x + (s_{0,0}^x - s_{1,1}^x)c_l^+ c_l + \\
&+ (s_{1,1}^x - s_{1,1}^x)d_l^+ d_l], \\
S_l^y &= \frac{i}{\sqrt{2}}[s_{0,1}^y(c_l^+ - c_l) + s_{1,1}^y(d_l^+ - d_l) + \\
&+ s_{1,0}^y(d_l^+ c_l - c_l^+ d_l)], \\
S_l^z &= s_{0,1}^z(c_l^+ + c_l) + s_{1,1}^z(d_l^+ + d_l) + \\
&+ s_{1,0}^z(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + s_{1,1}^z + (s_{0,0}^z - s_{1,1}^z)c_l^+ c_l + \\
&+ (s_{1,1}^z - s_{1,1}^z)d_l^+ d_l, \\
(S_l^y)^2 &= \frac{1}{2}[(s_{1,0}^y)^2 - (s_{1,1}^y)^2]c_l^+ c_l + \\
&+ ((s_{1,0}^y)^2 - (s_{0,1}^y)^2)d_l^+ d_l - \\
&- s_{1,0}^y s_{0,1}^y(d_l^+ + d_l) + s_{1,0}^y s_{1,1}^y(c_l^+ + c_l) + \\
&+ ((s_{0,1}^y)^2 + (s_{1,1}^y)^2) + s_{0,1}^y s_{1,1}^y(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l)].
\end{aligned}$$

Приведенные выражения после усреднения и применения спектральной теоремы для вычисления средних от бозе-операторов использовались для получения формул, на основе которых рассчитывались параметры порядка R_L , M и Q_2^0 .

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Barbara, Y. Imry, G. Sawatzky, and P. C. E. Stamp, *Quantum Magnetism*, NATO Science for Peace and Security, Series B: Physics and Biophysics, Springer (2008).
2. *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences, ed. by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer (2011).
3. A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York, Inc. (1994).
4. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Операторы Хаббарда и спин-волновая теория гейзенберговских магнетиков с произвольным спином*, ТМФ **50**, 466 (1982).
5. H. H. Chen and P. M. Levy, *Quadrupole Phase Transitions in Magnetic Solids*, Phys. Rev. Lett. **27**, 1383 (1971).
6. V. M. Matveev, *Quantum Quadrupolar Magnetism and Phase Transitions in the Presence of Biquadratic Exchange*, JETP **38**, 813 (1973).
7. M. P. Kashchenko, N. F. Balakhonov, and L. V. Kurbatov, *Spin Waves in an Heisenberg Ferromagnetic Substance with Single-Ion Anisotropy*, JETP **37**, 201 (1973).
8. V. M. Loktev and V. S. Ostrovskii, *Quantum Theory of Uniaxial Ferromagnetic in Transverse Magnetic Field*, Ukr. J. Phys. **23**, 1717 (1978).
9. F. P. Onufrieva, *Exact Solution of the One-Ion Problem for a Magnet with One-Ion Anisotropy in a Field of Arbitrary Direction*, JETP **53**, 1241 (1981).
10. A. F. Andreev and I. A. Grishchuk, *Spin Nematics*, JETP **60**, 267 (1984).
11. F. P. Onufrieva, *Low-Temperature Properties of Spin Systems with h Tensor Order Parameters*, JETP **62**, 1311 (1985).
12. N. Papanicolaou, *Unusual Phases in Quantum Spin-1 Systems*. Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).
13. A. V. Chubukov, *Fluctuations in Spin Nematics*, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 1593 (1990).
14. V. V. Val'kov and T. A. Val'kova, *Application of an Indefinite Metric to Go Over to a Bose Description of $Su(3)$ Hamiltonians: The Excitation Spectrum of Spin Nematics*, JETP **72**, 1053 (1991).
15. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klepets, *Spin Nematic and Orthogonal Nematic States in $S=1$ Non-Heisenberg Magnet*, J. Magn. Magn. Mat. **325**, 125 (2013).
16. А. И. Смирнов, *Магнитный резонанс спинов в квантовых магнетиках*, УФН **186**, 633 (2016) [A. I. Smirnov, *Magnetic Resonance of Spinons in Quantum Magnets*, Physics Uspekhi **59**, 564 (2016)].
17. O. A. Kosmachev, Ya. Yu. Matyunina, and Yu. A. Fridman, *Dynamic and Static Properties of a Non-Heisenberg Ferrimagnet with Single-Ion Easy-Axis Anisotropy*, JETP **135**, 354 (2022).
18. H. F. Verona de Resende, F. C. SaBarreto, and J. A. Plascak, *Renormalization Group Treatment of the Mixed-Spin System in D-Dimensional Lattices*, Physica A **149**, 606 (1988).
19. G. M. Zhang and C. Z. Yang, *Monte-Carlo Study of the Two-Dimensional Quadratic Ising Ferromagnet with Spins $S = 1/2$ and $S = 1$ and with Crystal-Field Interactions*, Phys. Rev. B **48**, 9452 (1993).
20. A. Bobak and M. Jurcisin, *A Discussion of Critical Behaviour in a Mixed-Spin Ising Model*, Physica A **240**, 647 (1997).

21. G. M. Buendia and M. A. Novotny, *Numerical Study of a Mixed Ising Ferrimagnetic System*, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 5951 (1997).
22. M. Godoy and W. Figueiredo, *Competing Dynamics in the Mixed-Spin Ising Model with Crystal-Field Interaction*, Physica A **339**, 392 (2004).
23. T. Iwashita and N. Uryu, *The Curie Temperature of the Two-Dimensional Quadratic Ising Ferromagnet with Mixed Spins of $S = 1/2$ and $S=1$* , J. Phys. Soc. Japan **53**, 721 (1984).
24. J. Oitmaa, *Ferrimagnetism and the Existence of Compensation Points in Layered Mixed Spin (1/2,1) Ising Models*, Phys. Rev. B **72**, 224404 (2005).
25. J. Oitmaa and I. G. Enting, *A Series Study of a Mixed-Spin $S = (1/2, 1)$ Ferrimagnetic Ising Model*, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 10931 (2006).
26. W. Selke and J. Oitmaa, *Monte Carlo Study of Mixed-Spin $S = (1/2, 1)$ Ising Ferrimagnets*, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 076004 (2010).
27. Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, *Квантовые эффекты в анизотропном ферримagnetике*, ФТТ **51**, 1104 (2009).
28. M. Zukovic and A. Bobak, *Frustrated Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferrimagnets on a Triangular Lattice*, Phys. Rev. E **91**, 052138 (2015).
29. M. Zukovic and A. Bobak, *Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferromagnets on a Triangular Lattice*, Physica A **436** 509 (2015).
30. E. S. de Santana, A. S. de Arruda, and M. Godoy, *Random-Anisotropy Mixed-Spin Ising on a Triangular Lattice*, Condensed Matter Physics, **26**, 23601 (2023).
31. A. S. Martynov and D. M. Dzebisashvili, *Quantum $Su(3)$ -Ferrimagnet on Triangular Lattice*, J. Magn. Magn. Mat. **584**, (2024) 171906.
32. B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, *Effective Field Theory for the $S=1$ Quantum Nematic*, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003).
33. A. Lauchli, F. Mila, and K. Penc, *Quadrupolar Phases of the $S=1$ Bilinear-Biquadratic Heisenberg Model on the Triangular Lattice*, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).
34. В. В. Вальков, М. С. Шустин, *Квантовые ренормировки в анизотропных многоподрешеточных магнетиках и модификация магнитной восприимчивости при облучении*, ЖЭТФ **148**, 984 (2015) [V. V. Val'kov and M. S. Shustin, *Quantum Renormalizations in Anisotropic Multisublattice Magnets and the Modification of Magnetic Susceptibility Under Irradiation*, JETP **121**, 860 (2015)].
35. V. V. Val'kov and M. S. Shustin, *Quantum Theory of Strongly Anisotropic Two- and Four-Sublattice Single-Chain Magnets*, J. Low Temp. Phys. **185**, 564 (2016).
36. Yu. A. Fridman and D. V. Spirin, *Spin Waves in Two-Dimensional Ferromagnet with Large Easy-Plane Anisotropy*, J. Magn. Magn. Mat. **253**, 111 (2002).
37. J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands III. An Improved Solutions*, Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).
38. A. V. Chubukov and D. I. Golosov, *Quantum Theory of an Antiferromagnet on a Triangular Lattice in a Magnetic Field*, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 69 (1991).
39. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Wiley-VCH (2019), Vol. 1.
40. V. V. Val'kov, *Unitary Transformations of the Group $U(n)$ and Diagonalization of Multilevel Hamiltonians*, Theor. Math. Phys. **76**, 766 (1988).
41. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, Москва (1967).
42. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Elsevier (2013), Vol. 3.
43. T. Coletta, T. A. Toth, K. Penc et al., *Semiclassical Theory of the Magnetization Process on the Triangular Lattice Heisenberg Model*, Phys. Rev. B **94**, 075136 (2016).

СТАЦИОНАРНЫЙ И НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ТОК В КОНЕЧНЫХ ЦЕПОЧКАХ КИТАЕВА

Ю. М. Билинский ^a, П. И. Арсеев ^{a*}, Н. С. Маслова ^b

^a Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 ноября 2024 г.,
после переработки 18 ноября 2024 г.
Принята к публикации 18 ноября 2024 г.

Исследована роль внутрищелевых состояний в процессах переноса заряда вдоль сверхпроводящей цепи Китаева конечной длины. При рассмотрении этой задачи мы используем формализм нестационарных функций Грина, которые содержат полную информацию о неравновесных и нестационарных свойствах системы. Мы обсудим туннельный ток и нестационарный перенос заряда в конечной цепи Китаева во внутрищелевом режиме. В предположении, что конечная цепь Китаева соединена на каждом крае со своим собственным внешним контактом (нормальным резервуаром), получим зависящее от времени поведение туннельного тока после внезапного изменения напряжения смещения на одном из контактов. Полученные результаты покажут, насколько быстро «майорановская мода» на одном краю цепи реагирует после того, как внешнее возмущение действует на «майорановскую моду» на другом краю. Представлены полностью аналитические прямые вычисления тока, в отличие от многих других методов.

DOI: 10.31857/S0044451025010109

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия большое внимание уделяется системам, в которых появляются состояния с «топологически необычными» свойствами. Однако для практического использования мы должны уметь оценивать конкретные физические характеристики рассматриваемой системы в дополнение к математической интерпретации свойств основного состояния системы. Одной из простейших моделей, демонстрирующих свойства, которые допускают топологическую интерпретацию, является атомная цепочка с p -волновой сверхпроводимостью бесспиновых частиц, предложенная А. Китаевым [1]. Основным интерес к модели в последующие годы был вызван нетривиальной топологической интерпретацией свойств ее основного состояния. Было показано, что в силу «топологических причин» внутри сверхпроводящей щели возникают квантовые состояния, локализованные на краях цепочки. Эти со-

стояния, часто называемые «майорановскими модами», обычно связывают с существованием квазичастиц [2], имеющих родство с майорановскими фермионами [3].

Возможные экспериментальные реализации этой модели обычно основаны на эффекте близости в полупроводниковых проводах с сильным спин-орбитальным взаимодействием, размещенных на сверхпроводниковой подложке [4–6]. Последние достижения в эксперименте и обсуждение возникающих трудностей можно найти в обзоре [7].

Принято считать, что дальнейшее развитие в этой области может быть связано с рассмотрением моделей с эффективным действием Джозефсона, учитывающим эффекты типа кулоновской блокады [8–13]. Есть надежда, что дальнodelствующее кулоновское взаимодействие может помочь передавать сигнал в системе конечных цепочек Китаева с использованием «состояний Майораны». Но эффекты перезарядки неизбежно включают процессы переноса заряда, поэтому мы должны быть уверены, что правильно описываем туннельный транспорт и эффекты переноса заряда сначала в самой простой туннельной схеме. Теоретические результаты мож-

* E-mail: ars@lpi.ru

но сравнить с экспериментами по туннелированию в различных условиях [14, 15].

Некоторые теоретические исследования предполагают, что «майорановские состояния» могут быть использованы в качестве защищенного от ошибок способа хранения и передачи информации в квантовой технологии [16, 17]. Однако если состояние защищено от произвольных изменений из-за внешнего шума, та же защита может сделать столь же сложным и целенаправленное изменение состояния системы, что, в свою очередь, может сделать невозможным использование системы для каких-либо практических приложений. Один из возможных способов изучить, насколько хорошо система реагирует на сигнал, — это исследовать ее нестационарные транспортные свойства.

В работе [18] нестационарные эффекты, связанные с модуляцией прозрачности туннельных барьеров, рассматривались в квазиклассическом подходе. В этой работе рассматривалась трехтерминальная система, в которой один из контактов фактически использовался для фиксации химического потенциала сверхпроводника. Мы будем рассматривать двух терминальную геометрию, в которой сверхпроводник связан только с двумя внешними контактами и для исследования роли локализованных состояний в нестационарных транспортных свойствах воспользуемся формализмом нестационарных функций Грина для электронов.

Ниже будет показано, что этот подход позволяет нам получать аналитически явные выражения для туннельного тока и нестационарного переноса заряда в отличие от более сложных методов, основанных на уравнении для матрицы плотности, обсуждаемых, например, в [19]. Также мы получаем возможность сравнить результаты квазиклассических расчетов с микроскопическими и найти связь параметров, использующихся в этих разных подходах.

Точные электронные функции Грина для бесконечной цепи Китаева в равновесии могут быть найдены аналитически [20]. Их можно использовать для нахождения нестационарных функций Грина конечной цепи, которые позволяют нам увидеть, как система развивается во времени, если мы применим к ней некоторое возмущение. Идея нашего рассмотрения состоит в том, чтобы рассматривать конечную цепь Китаева как разрезанную бесконечную цепь или цепь с сильными дефектами (для цепи с одним разрезом см., например, [21]). Этот трюк позволяет нам использовать функции Грина бесконечной цепочки для исследования всех одночастичных состояний в системе. Наши вычисления не требуют

какой-либо интерпретации особенностей в одночастичной функции Грина как некоторых особых «состояний». Заметим здесь, что полюса одночастичных функций Грина, которые появляются в щели сверхпроводника в этой модели, вряд ли можно интерпретировать как одночастичные возбуждения. Настоящие майорановские частицы, обсуждаемые в пионерских работах [3], являются хорошо определенными частицами (квазичастицами) с обычной алгеброй операторов рождения и уничтожения. В любой физической задаче такие реальные частицы вносят вклад в одночастичную функцию Грина с вычетом, равным единице. Известно, что связанные состояния, локализованные вокруг дефектов, таких как парамагнитные [22] или резонансные [23] примеси с энергиями, лежащими внутри щели, часто возникают в обычных сверхпроводниках. Такие состояния являются истинными одночастичными состояниями. В рассматриваемой задаче мы видим, что появление полюсов в электронной функции Грина в щели с вычетами, равными $1/2$, является скорее артефактом модели, имеющей вырожденное (в высокосимметричном случае) основное состояние, чем появлением новых квазичастиц.

В настоящей работе мы применяем подход, основанный на неравновесных электронных функциях Грина конечной цепочки Китаева. Мы начинаем с гамильтониана, выраженного через электронные операторы, который полностью описывает систему. Используя определение электронного тока, мы делаем точные вычисления без каких-либо приближений. В рамках этого подхода нет необходимости во введении операторов Майораны и усложнении диаграммных правил. Полученные выражения для функций Грина цепочки конечной длины используются для вычисления стационарного и зависящего от времени туннельного тока. Из этих выражений видно, что туннельный ток через «майорановские состояния» внутри щели всегда экспоненциально мал для длинных цепочек.

2. СВОЙСТВА ИЗОЛИРОВАННОЙ ЦЕПОЧКИ КИТАЕВА

В этом разделе мы кратко воспроизведем некоторые результаты, касающиеся спектральных свойств конечной цепи, используя формализм функций Грина, который мы будем использовать в дальнейших разделах.

Начнем со свободной идеальной цепочки Китаева, полностью изолированной от любых внешних

систем. Можно записать модельный гамильтониан такой системы как

$$\hat{H} = -\mu \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger \psi_n - t \sum_{n=1}^{N-1} (\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \psi_{n+1}^\dagger \psi_n) + \sum_{n=1}^{N-1} (\Delta \psi_n^\dagger \psi_{n+1}^\dagger + \Delta^* \psi_{n+1} \psi_n). \quad (1)$$

Здесь ψ_n^\dagger и ψ_n — операторы рождения и уничтожения частиц на узле n ; μ — химический потенциал; t — параметр перескока между двумя соседними узлами; Δ — параметр порядка сверхпроводимости, который в данной задаче мы считаем заданным параметром; N — общее число узлов в решетке.

Для нахождения точных решений функций Грина для гамильтониана (1) удобно использовать функции Грина бесконечной цепочки Китаева. Действительно, можно смоделировать поведение конечной цепочки, используя бесконечную цепочку с бесконечно сильными точечными дефектами $U \rightarrow +\infty$, добавленными в узлах 0 и $N+1$ (см. рис. 1). В результате частицы, находящиеся между этими двумя узлами, будут полностью изолированы от внешних

частей цепочки, а функции Грина будут идентичны функциям Грина конечной цепочки длины N , пока аргументы — номера узлов — лежат между 0 и $N+1$. Таким образом, поведение системы описывается следующим гамильтонианом, соответствующим системе на рисунке:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\mu \sum_n \psi_n^\dagger \psi_n - t \sum_n (\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \psi_{n+1}^\dagger \psi_n) + \\ &+ \sum_n (\Delta \psi_n^\dagger \psi_{n+1}^\dagger + \Delta^* \psi_{n+1} \psi_n), \\ \hat{V} &= U (\psi_0^\dagger \psi_0 + \psi_{N+1}^\dagger \psi_{N+1}). \end{aligned}$$

Этот гамильтониан идентичен гамильтониану (1) при $U \rightarrow \infty$. Чтобы найти физические свойства цепочки, мы воспользуемся формализмом нормальных и аномальных функций Грина, обозначенных как $G_{nm}(t, t')$, $F_{nm}(t, t')$ соответственно. В этой работе мы будем использовать следующие определения функций Грина:

$$\Gamma_{nm}^R(t, t') = \begin{pmatrix} G_{nm}^R(t, t') & F_{nm}^R(t, t') \\ F_{nm}^{R\dagger}(t, t') & G_{nm}^{R\dagger}(t, t') \end{pmatrix} = -i \left\langle \begin{pmatrix} \{\psi_n(t), \psi_m^\dagger(t')\} & \{\psi_n(t), \psi_m(t')\} \\ \{\psi_n^\dagger(t), \psi_m^\dagger(t')\} & \{\psi_n^\dagger(t), \psi_m(t')\} \end{pmatrix} \right\rangle \theta(t - t'), \quad (3)$$

$$\Gamma_{nm}^A(t, t') = \begin{pmatrix} G_{nm}^A(t, t') & F_{nm}^A(t, t') \\ F_{nm}^{A\dagger}(t, t') & G_{nm}^{A\dagger}(t, t') \end{pmatrix} = i \left\langle \begin{pmatrix} \{\psi_n(t), \psi_m^\dagger(t')\} & \{\psi_n(t), \psi_m(t')\} \\ \{\psi_n^\dagger(t), \psi_m^\dagger(t')\} & \{\psi_n^\dagger(t), \psi_m(t')\} \end{pmatrix} \right\rangle \theta(t' - t), \quad (4)$$

$$\Gamma_{nm}^<(t, t') = \begin{pmatrix} G_{nm}^<(t, t') & F_{nm}^<(t, t') \\ F_{nm}^{<\dagger}(t, t') & G_{nm}^{<\dagger}(t, t') \end{pmatrix} = -i \left\langle \begin{pmatrix} \psi_m^\dagger(t') \psi_n(t) & \psi_m(t') \psi_n(t) \\ \psi_m^\dagger(t') \psi_n^\dagger(t) & \psi_m(t') \psi_n^\dagger(t) \end{pmatrix} \right\rangle, \quad (5)$$

Здесь $\{\hat{a}, \hat{b}\} = \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$, $\langle \hat{a} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{a})$. Индексы R и A обозначают запаздывающие и опережающие функции Грина.

Используя уравнение Дайсона для гамильтониана (2), мы можем выразить запаздывающие функции Грина $\Gamma_{nm}^R(t, t')$ конечной цепочки в терминах функций Грина $\Gamma_{nm}^{0R}(t, t')$ бесконечной цепочки. В Приложении показано, что функции $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ имеют полюсы в точках $\omega = \pm\omega_0$, где

$$\omega_0 = \frac{|\Delta| (4t^2 - \mu^2)}{it\sqrt{4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2}} (\chi_+^{N+1} - \chi_-^{N+1}). \quad (6)$$

Здесь

$$\chi_{\pm} = \frac{-\mu \pm i\sqrt{4t^2 - (\mu^2 + 4|\Delta|^2)}}{2(t + |\Delta|)}. \quad (7)$$

Поскольку $|\chi_{\pm}| < 1$ (см. 52), выражение (6) записано для случая $|\chi_{\pm}|^N \ll 1$. Для достаточно больших N ω_0 мало по сравнению с другими параметрами системы и убывает экспоненциально при увеличении длины цепочки N .

Для случаев $|\Delta| \ll t$ и $|\Delta| < t$, $|\Delta| \rightarrow t$ «экспоненциальная малость» выражения (6) по N может быть показана явно:

$$\omega_0 = \begin{cases} 4|\Delta| e^{-N(|\Delta|/t)}, & |\Delta| \ll t, \\ 2te^{-N \ln(\sqrt{2t/(t-|\Delta|)})}, & (t - |\Delta|) \ll t. \end{cases} \quad (8)$$

Экспоненциальное убывание ω_0 при увеличении длины цепочки объясняется экспоненциально слабым перекрытием двух связанных состояний на противоположных краях цепочки. Используя (8), мы

можем оценить длину локализации связанных состояний как

$$l_{loc} \simeq \begin{cases} a(t/|\Delta|), & |\Delta| \ll t, \\ a/\ln\left(\sqrt{2t/(t-|\Delta|)}\right), & (t-|\Delta|) \ll t, \end{cases} \quad (9)$$

где a — постоянная решетки.

Такая экспоненциальная зависимость наблюдалась в эксперименте по туннелированию с использованием методов кулоновской блокады, описанном в [15].

В пределе $N \rightarrow \infty$ состояния вокруг каждого края цепи начинают вести себя так, как будто цепь полубесконечна. При этом эти два полюса с вычетами, равными $1/2$, вместе соответствуют одному возбуждению Ферми, которое разделено между двумя краями цепи. Таким образом, вычет в терминах соответствующих возбуждений Боголюбова равен 1, как и должно быть. Но глядя только на один конец цепи, мы «видим» только половину этого возбуждения. Это возбуждение Ферми очень специфично, потому что это возбуждение, которое связывает два основных состояния с разной четностью (числом электронов), но с вырожденными энергиями.

Это утверждение можно легко проиллюстрировать на простом примере двухузельной цепи. Гамильтониан (1) для двух сайтов можно легко диагонализировать с помощью преобразования Боголюбова. В терминах операторов Боголюбова гамильтониан принимает вид

$$\hat{H}_2 = E_0 + \varepsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \varepsilon_2 c_2^\dagger c_2, \quad (10)$$

где

$$c_{1,2} = u \frac{(\psi_1 + \psi_2)}{\sqrt{2}} \pm v \frac{(\psi_1^\dagger - \psi_2^\dagger)}{\sqrt{2}}, \\ v^2, u^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\mu}{t}\right), \\ \varepsilon_{1,2} = t \left(1 \mp \frac{\Delta}{\sqrt{t^2 - \mu^2}}\right).$$

Для $\Delta = \sqrt{t^2 - \mu^2}$ (что в случае $\mu = 0$ дает $\Delta = t$) мы получаем $\varepsilon_1 = 0$ (решение (53) для случая $N = 2$, $\omega = 0$). Тогда $|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^\dagger - \psi_2^\dagger)|0\rangle$ соответствует основному состоянию и удовлетворяет $c_{1,2}|\Phi_0\rangle = 0$. В то же время, состояние $|\Phi_1\rangle = c_1^\dagger|\Phi_0\rangle = (v + u\psi_1^\dagger\psi_2^\dagger)|0\rangle$ тоже имеет нулевую энергию, что означает, что основное состояние вырождено. Для матричных элементов между этими основными состояниями мы имеем

$$\langle\Phi_0|\psi_1|\Phi_1\rangle = u/\sqrt{2}, \quad \langle\Phi_1|\psi_1|\Phi_0\rangle = v/\sqrt{2}.$$



Рис. 1. Бесконечная цепочка Китаева с двумя дефектами

Это означает, что в одночастичной функции G_{11} при $\omega = 0$ появляется полюс с вычетом, равным $1/2$.

3. ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК

Сначала рассмотрим стационарные туннельные свойства цепи Китаева. Для этого мы предположим, что в узлах 1 и N цепь присоединена к двум внешними резервуарам с большим числом степеней свободы, обозначенными индексами l и r соответственно. Тогда полный гамильтониан можно записать как

$$\hat{H} = \hat{H} + \sum_p \tau_p^l \left(h_p^\dagger \psi_1 + \psi_1^\dagger h_p^l \right) + \\ + \sum_p \tau_p^r \left(h_p^\dagger \psi_N + \psi_N^\dagger h_p^r \right) + \\ + \sum_p E_p^l h_p^\dagger h_p^l + \sum_p E_p^r h_p^\dagger h_p^r. \quad (11)$$

Ток, текущий в цепь через узел 1, определяется обычным способом ([24]) как

$$I_l(t) = i \sum_p \tau_p^l \left\langle h_p^\dagger \psi_1 - \psi_1^\dagger h_p^l \right\rangle. \quad (12)$$

Используя формализм нестационарной диаграммной техники, это выражение можно переписать как

$$I_l(t) = - \sum_p \tau_p^l \left(\tilde{G}_{lp,1}^<(t,t) - \tilde{G}_{1,lp}^<(t,t) \right), \quad (13)$$

где

$$\tilde{G}_{lp,1}^<(t,t) = \int dt_1 g_{lp}^<(t,t_1) \tau_p^l \tilde{G}_{1,1}^A(t_1,t) + \\ + \int dt_1 g_{lp}^R(t,t_1) \tau_p^l \tilde{G}_{1,1}^<(t_1,t), \\ \tilde{G}_{1,lp}^<(t,t) = \int dt_1 \tilde{G}_{1,1}^<(t,t_1) \tau_p^l g_{lp}^A(t_1,t) + \\ + \int dt_1 \tilde{G}_{1,1}^R(t,t_1) \tau_p^l g_{lp}^<(t_1,t).$$

Параметр p соответствует состояниям внутри обоих резервуаров; $g_{\alpha p}(\omega)$ — функция Грина в резервуаре α , когда он отсоединен от цепочки, где α принимает значения l и r ; $\tilde{G}_{n,m}^R(t,t_1)$ — точные функции Грина цепи, учитывающие переходы в резервуары.

Существенно, что туннельный гамильтониан (11) и туннельный ток (12) выражены в терминах

настоящих электронных операторов, и заведомо дают ответ для реального электрического тока в системе.

Отметим, что попытки использовать эффективные гамильтонианы в терминах операторов майорановских квазичастиц часто приводят, на наш взгляд, к сомнительным ответам, так как обращение с майорановскими операторами требует большой осторожности и внимания. Из-за клиффордовских перестановочных соотношений непосредственно для майорановских операторов нет теоремы Вика и парные корреляторы не имеют смысла функций Грина, составляющих основу обычной диаграммной техники. В расчетах, представленных в статье, мы не сталкиваемся с какими-либо сложностями, с которыми мы столкнулись бы, если бы работали с операторами Майораны. Для задачи о конечной цепочке Китаева произвольной длины, вставленной между двумя проводниками и описываемой гамильтонианом (11), мы вычислили точно электронный ток (12). Неудивительно, что могут появляться некоторые расхождения между нашими результатами и результатами [25–27] и других авторов, поскольку последние были получены с использованием ряда приближений в представлении операторов Майораны.

В дальнейшем мы, как обычно, предполагаем, что из-за большого числа частиц и степеней свободы в каждом резервуаре функция распределения частиц существенно не меняется на протяжении всего эксперимента и, следовательно, каждый резервуар остается практически в равновесном состоянии. Однако система в целом не находится в равновесии, хотя в этом разделе мы считаем ее стационарной, а величина тока не меняется со временем. Таким образом, выражение (13) можно переписать с использованием частотно-зависимых функций Грина следующим образом:

$$I_l = - \sum_p \tau_p^l \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\tilde{G}_{lp,1}^<(\omega) - \tilde{G}_{1,lp}^<(\omega) \right). \quad (14)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{lp,1}^<(\omega) &= g_{lp}^<(\omega) \tau_p^l \tilde{G}_{1,1}^A(\omega) + g_{lp}^R(\omega) \tau_p^l \tilde{G}_{1,1}^<(\omega), \\ \tilde{G}_{1,lp}^<(t, t) &= \tilde{G}_{1,1}^<(\omega) \tau_p^l g_{lp}^A(\omega) + \tilde{G}_{1,1}^R(\omega) \tau_p^l g_{lp}^<(\omega). \end{aligned} \quad (15)$$

Мы можем упростить это выражение, если введем неприводимую часть

$$\Sigma_\alpha^{R(A,<)}(\omega) = \sum_p (\tau_p^\alpha)^2 g_{\alpha p}^{R(A,<)}(\omega). \quad (16)$$

Тогда мы можем использовать, что

$$\Sigma_\alpha^<(\omega) = n_\alpha(\omega) (\Sigma_\alpha^A(\omega) - \Sigma_\alpha^R(\omega)),$$

где $n_\alpha(\omega)$ — функции распределения Ферми–Дирака для резервуаров l и r . Тогда уравнение (14) может быть переписано как

$$\begin{aligned} \hat{I}_l &= - \int \frac{d\omega}{2\pi} (\Sigma_l^A(\omega) - \Sigma_l^R(\omega)) \times \\ &\times \left(n_l(\omega) (\tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\omega) - \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\omega)) - \tilde{\Gamma}_{1,1}^<(\omega) \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь ток I_l задается верхним левым элементом матрицы \hat{I}_l (\hat{I}_l^{11}). Выражение этого типа в терминах неравновесных функций Грина было впервые выведено в [24] и позже применено в [28]. Это выражение кажется асимметричным относительно левого и правого контакта. Но для стационарного случая правильно рассчитанный ток (17) всегда можно записать в явно симметричной форме.

В нашем случае уравнение (17) упрощается дальше с помощью соотношений

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{1,1}^<(\omega) &= \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\omega) \Sigma_l^<(\omega) \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\omega) + \\ &+ \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega) \Sigma_r^<(\omega) \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\omega), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{1,1}^\delta(\omega) &= \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\omega) \Sigma_l^\delta(\omega) \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\omega) + \\ &+ \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega) \Sigma_r^\delta(\omega) \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\omega). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{1,1}^\delta(\omega) &= \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\omega) - \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\omega), \\ \Sigma_\alpha^\delta(\omega) &= \Sigma_\alpha^A(\omega) - \Sigma_\alpha^R(\omega). \end{aligned}$$

Используя широзонное приближение для резервуаров, будем считать, что для рассматриваемых значений ω выполняется $\Sigma_{l(r)}^A(\omega) \approx i\gamma_{l(r)}$, $\Sigma_{l(r)}^R(\omega) \approx -i\gamma_{l(r)}$, где $\gamma_{l(r)} = \pi \nu^{l(r)} (\tau_p^{l(r)})^2$ и $\nu^{l(r)}$ — плотность состояний в резервуаре $l(r)$.

Прямая подстановка дает

$$\hat{I}_l = 4\gamma_l \gamma_r \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega) \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\omega) (n_l(\omega) - n_r(\omega)). \quad (20)$$

Формула такого типа была выведена в [24]. Следует отметить, что полученное уравнение для тока через систему симметрично относительно двух ее краев. Это, естественно, означает, что в стационарном случае ток, втекающий в систему, равен току, вытекающему из нее. Сохранение полного тока не может быть нарушено ни в одной системе и не требует дополнительных условий, таких как равные скорости туннелирования или симметрично приложенное напряжение на разных краях. Таким образом, появление асимметричных выражений для ста-

ционального туннельного тока, полученных в некоторых работах, касающихся систем типа цепочки Китаева (например, [29]), является сигналом к проверке применяемого приближения. Это утверждение не меняется для систем со взаимодействием, но вывод явно симметричного выражения в этом случае более сложен. Примеры такого расчета для систем с электрон-фононным взаимодействием приведены, например, в [30, 31]. Подчеркнем, что уравнение (20) является точным и явно симметричным для левого и правого контактов.

Поскольку мы стремимся исследовать свойства низкоэнергетического связанного состояния, соответствующего «майорановской моде», мы рассмотрим случай, когда приложенное напряжение меньше величины сверхпроводящей щели. В этом случае мы исключаем влияние квазичастичных состояний непрерывного спектра. Чтобы выразить $\tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega)$ через функции Грина изолированной цепочки

ки $\Gamma_{n,m}^R(\omega)$, мы используем уравнение Дайсона

$$\tilde{\Gamma}_{n,m}^R(\omega) = \Gamma_{n,m}^R(\omega) + \Gamma_{n,1}^R(\omega) \Sigma_l^R(\omega) \tilde{\Gamma}_{1,m}^R(\omega) + \Gamma_{n,N}^R(\omega) \Sigma_r^R(\omega) \tilde{\Gamma}_{N,m}^R(\omega). \quad (21)$$

Простые алгебраические преобразования дают

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega) &= \left[\hat{I} + \gamma_l \gamma_r \left(\hat{I} + i\gamma_l \Gamma_{1,1}^R(\omega) \right) \Gamma_{1,N}^R(\omega) \times \right. \\ &\quad \times \left. \left(\hat{I} + i\gamma_r \Gamma_{N,N}^R(\omega) \right) \Gamma_{N,1}^R(\omega) \right]^{-1} \times \\ &\quad \times \left(\hat{I} + i\gamma_l \Gamma_{1,1}^R(\omega) \right) \Gamma_{1,N}^R(\omega) \left(\hat{I} + i\gamma_r \Gamma_{N,N}^R(\omega) \right). \end{aligned}$$

где \hat{I} — единичная матрица. Явная форма функций Грина $\Gamma_{n,m}^R(\omega)$ для $|\omega| \ll |\Delta|$, t выводится в Приложении. Простую форму можно получить, если $\Delta^2/(t\gamma) \gg 1$. Сохраняя ведущие члены в (55) по этому параметру, получаем

$$\tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\omega) = \frac{C\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2 + 2i(\gamma_l + \gamma_r)C\omega - 4\gamma_l\gamma_r C^2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$C \equiv -\frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{2t(4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2)}(\chi_+ - \chi_-)^2 = \frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{2t(t + |\Delta|)^2}. \quad (23)$$

Подставляя этот ответ в (20), мы получаем

$$I_l = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{8\gamma_l\gamma_r C^2 \omega_0^2}{|\omega^2 - \omega_0^2 + 2i(\gamma_l + \gamma_r)C\omega - 4\gamma_l\gamma_r C^2|^2} (n_l(\omega) - n_r(\omega)). \quad (24)$$

Эти и дальнейшие вычисления производятся для следующей иерархии параметров: $t > \Delta > \gamma_{l,r}$. В случае $\gamma_{l,r} > \Delta$ мы не можем исключить влияние непрерывной части спектра на проводимость, а информация о низкоэнергетических резонансах теряется, поэтому этот случай мы рассматривать не будем.

Мы видим, что величина тока (25) прямо пропорциональна ω_0^2 , поэтому ток экспоненциально уменьшается с увеличением длины цепи. Более того, если $\omega_0 = 0$, что обычно ассоциируется с частицами Майораны, ток через систему вообще не течет. Обратим внимание, что уравнение (25) симметрично по параметрам контактов l и r , как и должно быть. Аналогичное выражение для нормальной компоненты тока было получено в квазиклассическом подходе в работе [18], где также было отмечено, что пик при нулевом напряжении в туннельной проводимости вряд ли может быть замечен при реальном со-

отношении между ω_0 и $\gamma_{l,r}$.

Пик в туннельной проводимости, связанный с майорановскими состояниями, также исследовался в работе [32]. В данной работе рассматривался один NS-контакт, в котором предполагалось, что химический потенциал сверхпроводника каким-то образом фиксирован. Задача решалась методом эффективного коэффициента прохождения для квазичастиц, что при наличии связанного состояния всегда приводит к формулам типа (25). Однако амплитуду пика для двух разных систем: одиночный NS-контакт и сверхпроводник между двумя нормальными контактами, напрямую сравнивать нельзя из-за проблемы фиксации химического потенциала сверхпроводника. Заметим, что результаты, аналогичные работе [32], для тока в NS-контакте при учете майорановских состояний, могут быть получены также методами работы [33].

Если в формуле (25) приложенное напряжение больше ширины локализованных состояний, но меньше значения сверхпроводящей щели, что дает $n_l(\omega) - n_r(\omega) = 1$ для $|\omega| \lesssim \gamma_l, \gamma_r$, то мы получаем простое окончательное выражение для туннельного тока, связанного с майорановскими модами:

$$I_l = \frac{2\gamma_l\gamma_r C\omega_0^2}{\gamma_l + \gamma_r} \frac{1}{4\gamma_l\gamma_r C^2 + \omega_0^2}. \quad (25)$$

Таким образом, величина тока всегда определяется наименьшей из тех скоростей переноса, которые есть в системе (слабым звеном системы); в нашем случае эти скорости определяются параметрами $\omega_0^2/(\gamma_l + \gamma_r), \gamma_l, \gamma_r$. Если $\omega_0^2 \geq C^2\gamma_l\gamma_r$, то общее уравнение (25) приводит к значению тока, пропорциональному $\gamma_l\gamma_r/(\gamma_l + \gamma_r)$, что является обычным выражением для туннелирования через промежуточное состояние. Для рассматриваемой системы физически обоснованным выглядит соотношение $\omega_0 \ll \gamma_l, \gamma_r$. Используя его, получаем

$$I_l = \frac{\omega_0^2}{2C(\gamma_l + \gamma_r)}. \quad (26)$$

Если мы используем уравнения (8) и (23), то эта формула дает

$$I = \begin{cases} \frac{2\Delta t}{(\gamma_l + \gamma_r)} e^{-2N(\Delta/t)}, & \Delta \ll t, \\ \frac{2t^2}{(\gamma_l + \gamma_r)} e^{-N \ln(2t/(t-\Delta))}, & (t - \Delta) \ll t. \end{cases} \quad (27)$$

Для произвольных параметров $\mu < \Delta < t$ ток всегда мал в длинных цепочках. В случае $\omega_0 = 0$, который считается наиболее благоприятным случаем для наблюдения необычных топологических свойств, мы вообще не сможем увидеть пик туннельной проводимости при нулевом напряжении. Это наблюдение справедливо для модели, рассмотренной в статье, с двумя контактами на краях цепочки. Для измерения стационарного тока в любом эксперименте необходимо иметь по крайней мере два внешних провода, подключенных, скажем, к «левому» и «правому» краям системы. Конечно, существуют и более сложные многоконтактные схемы, но их рассмотрение выходит за рамки данной статьи. Реальные гибридные структуры полупроводник-сверхпроводник, имитирующие цепочку Китаева, требуют рассмотрения модельного гамильтониана, описывающего полупроводниковую проволоку с сильным спин-орбитальным взаимодействием, связанную эффектами близости с нижним слоем из сверхпроводника. В этом случае можно рассматривать сверхпроводник как резервуар с

фиксированным химическим потенциалом, а «второй контакт» как контакт между полупроводником и сверхпроводником. В качестве альтернативы соединению на краях мы могли бы также рассмотреть модель цепи Китаева, лежащей на подложке, где все атомы цепи слабо связаны с соответствующими атомами подложки. В этом случае «второй контакт» с резервуаром становится распределенным в пространстве. Эта проблема может быть решена, но она отличается от проблемы, рассмотренной в нашей статье. Тем не менее, если перекрытие локализованного состояния с состояниями резервуара мало, пик тока вблизи нулевого смещения также должен быть малым. Его значение в случае распределенного в пространстве «второго контакта» не будет экспоненциально зависеть от длины цепи, но все равно будет намного меньше, чем ожидается из наивных формул. Это может быть возможной причиной того, что пик нулевого смещения часто плохо наблюдается в обычных туннельных экспериментах [14].

Мы хотели бы подчеркнуть, что наивно используемые общие формулы для туннельного тока между двумя контактами часто вводят в заблуждение, когда их используют для низкоразмерных систем и таких объектов, как цепочка Китаева [21], из-за возможного появления локализованных состояний в области контакта.

Ответ низшего порядка (второго порядка по туннельной связи) квантово-механической теории возмущений описывает ток только в начальный момент времени после «включения» связи, но стационарное значение туннельного тока можно вычислить только с помощью полной системы кинетических уравнений или, что то же самое по сути, полной системы уравнений для нестационарных функций Келдыша–Грина. Только в простых системах с непрерывным спектром и неявно предполагаемой быстрой релаксацией электронов к равновесному распределению эта формула, апеллирующая к равновесной локальной плотности состояний выводов, заведомо справедлива.

Поясним эту идею на примере туннельного контакта с локализованным состоянием на краю одного из контактов. Это локализованное состояние дает резкий пик в локальной плотности состояний, и вносит вклад в простейшую формулу для туннельного тока. Предположим, что это состояние пусто в первый момент (лежит выше уровня Ферми). Затем сразу после того, как мы «включили» положительное напряжение смещения на другой провод, ток начинает течь в это пустое локализованное состояние. Но после некоторого времени релаксации,

определяемого скоростью туннелирования, это состояние становится заполненным, и после этого ни один электрон не может туннелировать в это состояние. Стационарный туннельный ток обращается в ноль, хотя самая простая формула все еще дает вам что-то вроде «нулевого пика» в туннельной проводимости. Чтобы это локализованное состояние повлияло на стационарный ток, нужно включить некоторые неупругие процессы, ответственные за удаление (или добавление) электронов из этого локализованного состояния. Для системы конечного размера также возможно, что это локализованное на одном краю системы состояние имеет некоторое перекрытие со вторым контактом. (И это наш случай и случай с распределенным «заземленным контактом» в реальной системе.)

В обычной формуле для туннельного тока, которая использует локальную плотность состояний контактов, неявно предполагается, что в любой момент мы фиксируем химические потенциалы для всех состояний контактов. Для поддержания постоянного химического потенциала система должна быть соединена с некоторым резервуаром через контакт, обеспечивающий обмен частицами. Таким образом, если мы говорим, что мы фиксируем химический потенциал локализованных состояний, то мы имеем в виду, что неявным образом учитываем некоторые неупругие релаксационные процессы или прямую связь с резервуаром для этих состояний.

4. НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ТОК

Теперь попытаемся ответить на вопрос о том, каковы типичные временные масштабы для тока или переноса заряда с одного края цепи на другой. Мы поставим вопрос по другому, чем это было сделано в статье [18], где исследовалось влияние периодического изменения туннельной прозрачности барьеров на туннельную проводимость при нулевом напряжении на системе. Для такой постановки задачи интересным результатом стало обнаружение и исследование резонанса между частотой внешнего воздей-

ствия и расщеплением ω_0 майорановских состояний. Нас же будут интересовать характерные скорости переходных процессов. Для этого предположим, что система в целом находится в равновесии при $t < 0$, а затем при $t = 0$ к одному из выводов прикладывается напряжение. Это дополнительное напряжение вызывает нестационарный ток, который при $t \rightarrow +\infty$ достигает стационарного значения (25).

Приложенное напряжение смещает уровни энергии в резервуарах на V_α , где индекс α обозначает резервуар. Таким образом, гамильтониан резервуаров теперь можно записать как

$$\hat{H}_\alpha(t) = \sum_p \tau_p^\alpha \left(h_p^{\alpha\dagger} \psi_1 + \psi_1^\dagger h_p^\alpha \right) + \sum_p \left(E_p^\alpha + V_\alpha \theta(t) \right) h_p^{\alpha\dagger} h_p^\alpha. \quad (28)$$

Ток, текущий из левого резервуара в систему, определяется как (для «правого» контакта r все формулы можно записать так же)

$$I_l(t) = - \int dt' \left(\Sigma_l^<(t, t') \tilde{G}_{1,1}^A(t', t) + \Sigma_l^R(t, t_1) \tilde{G}_{1,1}^<(t', t) - \tilde{G}_{1,1}^<(t, t') \Sigma_l^A(t', t) - \tilde{G}_{1,1}^R(t, t') \Sigma_l^<(t', t) \right). \quad (29)$$

Здесь неприводимая часть имеет вид

$$\Sigma_\alpha^R(t, t') = -i \sum_p (\tau_p^\alpha)^2 \theta(t - t') \times \exp \left(-i E_p^\alpha (t - t') - i V_\alpha \int_{t'}^t dt_1 \theta(t_1) \right), \quad (30)$$

$$\Sigma_\alpha^<(t, t') = i \sum_p (\tau_p^\alpha)^2 n_p^\alpha \times \exp \left(-i E_p^\alpha (t - t') - i V_\alpha \int_{t'}^t dt_1 \theta(t_1) \right). \quad (31)$$

В частотном представлении эти выражения соответствуют формулам

$$\Sigma_\alpha^R(\omega, \omega') = -i(\tau^\alpha)^2 \int d\varepsilon \nu^\alpha(\varepsilon) \left[-\frac{1}{\omega - \varepsilon - V_\alpha + 2i\delta} \left(-\frac{1}{\omega' - \omega - 2i\delta} + \frac{1}{\omega' - \omega + V_\alpha} \right) + \frac{1}{\omega' - \varepsilon + 2i\delta} \left(-\frac{1}{\omega - \omega' - V_\alpha} + \frac{1}{\omega - \omega' - 2i\delta} \right) \right], \quad (32)$$

$$\Sigma_\alpha^<(\omega, \omega') = i(\tau^\alpha)^2 \int d\varepsilon \nu^\alpha(\varepsilon) n^\alpha(\varepsilon) \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - V_\alpha + i\delta} - \frac{1}{\omega - \varepsilon - i\delta} \right) \left(\frac{1}{\omega' - \varepsilon - V_\alpha - i\delta} - \frac{1}{\omega' - \varepsilon + i\delta} \right). \quad (33)$$

Здесь $\nu^\alpha(\varepsilon)$ — плотность состояний в резервуаре α , $\delta \rightarrow +0$. Для простоты предположим, что τ^α не зависит от p . Для широкозонного приближения, когда мы предполагаем, что $\nu(\varepsilon)$ существенно не меняется для $\varepsilon \sim \omega, \omega', V_{l,r}$, эти выражения упрощаются до

$$\begin{aligned}\Sigma_l^R(\omega, \omega') &= -i\gamma_l 2\pi\delta(\omega' - \omega), \\ \Sigma_l^<(\omega, \omega') &= \frac{i\gamma_l}{\pi} \int d\varepsilon n^l(\varepsilon) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - V_l + i\delta} - \frac{1}{\omega - \varepsilon - i\delta} \right) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega' - \varepsilon - V_l - i\delta} - \frac{1}{\omega' - \varepsilon + i\delta} \right).\end{aligned}$$

В результате в частотном представлении (29) упрощается до

$$\hat{I}_l(\omega) = - \int \frac{d\Omega}{2\pi} \left(\Sigma_l^<(\Omega, \Omega - \omega) \tilde{\Gamma}_{1,1}^\delta(\Omega - \omega) - 2i\gamma_l \tilde{\Gamma}_{1,1}^<(\Omega, \Omega - \omega) \right). \quad (34)$$

Здесь

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{1,1}^<(\Omega, \Omega - \omega) &= \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\Omega) \Sigma_l^<(\Omega, \Omega - \omega) \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\Omega - \omega) + \\ &+ \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\Omega) \Sigma_r^<(\Omega, \Omega - \omega) \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\Omega - \omega), \\ \tilde{\Gamma}_{1,1}^\delta(\Omega - \omega) &= \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\Omega - \omega) - \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\Omega).\end{aligned}$$

Используя уравнения Дайсона для запаздывающих и опережающих функций Грина, мы можем показать, что

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{1,1}^\delta(\Omega - \omega) &= \omega \sum_{n=1}^N \Gamma_{1,n}^R(\Omega) \Gamma_{n,1}^A(\Omega - \omega) + \\ &+ \tilde{\Gamma}_{1,1}^R(\Omega) 2i\gamma_l \tilde{\Gamma}_{1,1}^A(\Omega - \omega) + \\ &+ \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\Omega) 2i\gamma_r \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\Omega - \omega).\end{aligned}$$

Подставляя два последних выражения в (34), получим

$$\begin{aligned}\hat{I}_l(\omega) &= - \int \frac{d\Omega}{2\pi} \left(\omega \sum_{n=1}^N \tilde{\Gamma}_{1,n}^R(\Omega) \tilde{\Gamma}_{n,1}^A(\Omega - \omega) \times \right. \\ &\times \Sigma_l^<(\Omega, \Omega - \omega) + \\ &+ 2i(\gamma_r \Sigma_l^<(\Omega, \Omega - \omega) - \gamma_l \Sigma_r^<(\Omega, \Omega - \omega) \times \\ &\times \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\Omega) \tilde{\Gamma}_{N,1}^A(\Omega - \omega) \Big). \quad (35)\end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}\Sigma_r^<(\omega, \omega') &= \frac{i\gamma_r}{\pi} \int d\varepsilon n^r(\varepsilon) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - V_r + i\delta} - \frac{1}{\omega - \varepsilon - i\delta} \right) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega' - \varepsilon - V_r - i\delta} - \frac{1}{\omega' - \varepsilon + i\delta} \right).\end{aligned} \quad (36)$$

Мы видим, что первый член в (35) существует только если $V_l \neq 0$ и не зависит напрямую от свойств резервуара r . Это означает, что этот член соответствует заполнению состояний на левом краю цепи из-за изменения ее химического потенциала. Следовательно, второй член представляет собой ток, который течет из одного резервуара в другой через всю цепочку. Если рассмотреть только второй член, то получим

$$\begin{aligned}\hat{I}_l(t) &= \frac{2\gamma_l\gamma_r}{\pi} \int d\varepsilon dV \hat{M}_{1,N}(t, \varepsilon, V) \left(\hat{M}_{1,N}(t, \varepsilon, V) \right)^\dagger \times \\ &\times [n^l(\varepsilon)\delta(V - V_l) - n^r(\varepsilon)\delta(V - V_r)], \\ \hat{M}_{1,N}(t, \varepsilon, V) &= \int \frac{d\Omega}{2\pi} e^{-i\Omega t} \tilde{\Gamma}_{1,N}^R(\Omega) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\Omega - \varepsilon - V + i\delta} - \frac{1}{\Omega - \varepsilon - i\delta} \right).\end{aligned}$$

Поскольку нашей задачей является изучить перенос возмущения через цепочку, будем считать, что в момент времени $t = 0$ напряжение меняется только на правом контакте, и будем смотреть на зависящий от времени ток в левый контакт при условии $V_l = 0$. Тогда прямыми вычислениями можем получить, что

$$\begin{aligned}\hat{M}_{1,N}(t, \varepsilon, V) &= -i\theta(-t) \frac{e^{-i\varepsilon t} C\omega_0}{(\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} - i\theta(t) \frac{e^{-i(\varepsilon + V_r)t} C\omega_0}{(\varepsilon + V + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} - \\ &- \frac{iC\omega_0\theta(t)}{2\bar{\omega}} e^{-C(\gamma_l + \gamma_r)t - i\bar{\omega}t} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{\varepsilon + V + iC(\gamma_l + \gamma_r) - \bar{\omega}} + \frac{1}{\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r) - \bar{\omega}} \right) - \\ &- \frac{iC\omega_0\theta(t)}{-2\bar{\omega}} e^{-C(\gamma_l + \gamma_r)t + i\bar{\omega}t} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{\varepsilon + V + iC(\gamma_l + \gamma_r) + \bar{\omega}} + \frac{1}{\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r) + \bar{\omega}} \right).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_l(t) = & \frac{4\gamma_l\gamma_r C^2 \omega_0^2}{\pi} \theta(t) \int d\varepsilon n^l(\varepsilon) \left| \frac{1}{(\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} \right|^2 - \\
& - \frac{4\gamma_l\gamma_r C^2 \omega_0^2}{\pi} \theta(t) \int d\varepsilon n^r(\varepsilon - V_r) \times \\
& \times \left| -\frac{e^{-i\varepsilon t}}{(\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} - \frac{1}{2\bar{\omega}} e^{-C(\gamma_l + \gamma_r)t - i\bar{\omega}t} \left(-\frac{1}{\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r) - \bar{\omega}} + \frac{1}{\varepsilon - V_r + iC(\gamma_l + \gamma_r) - \bar{\omega}} \right) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2\bar{\omega}} e^{-C(\gamma_l + \gamma_r)t + i\bar{\omega}t} \left(-\frac{1}{\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r) + \bar{\omega}} + \frac{1}{\varepsilon - V_r + iC(\gamma_l + \gamma_r) + \bar{\omega}} \right) \right|^2.
\end{aligned}$$

Здесь

$$\bar{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 - C^2(\gamma_l - \gamma_r)^2}. \quad (37)$$

Как и ожидалось, если $t \rightarrow \infty$, то ток приближается к своему стационарному значению (25):

$$\begin{aligned}
I_l(t \rightarrow \infty) = & \frac{4\gamma_l\gamma_r C^2 \omega_0^2}{\pi} \theta(t) \times \\
& \times \int d\varepsilon (n^l(\varepsilon) - n^r(\varepsilon - V_r)) \times \\
& \times \left| \frac{1}{(\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} \right|^2.
\end{aligned}$$

Если $t \rightarrow +0$, ток на противоположном краю цепи не наблюдается, что иллюстрирует непрерывность изменения тока при проходе через $t = 0$:

$$\begin{aligned}
I_l(t \rightarrow +0) = & \frac{4\gamma_l\gamma_r C^2 \omega_0^2}{\pi} \theta(t) \times \\
& \times \int d\varepsilon (n^l(\varepsilon) - n^r(\varepsilon)) \times \\
& \times \left| \frac{1}{(\varepsilon + iC(\gamma_l + \gamma_r))^2 - \bar{\omega}^2} \right|^2 = 0.
\end{aligned}$$

Если теперь, как и в предыдущем разделе, нас интересует роль «майорановских состояний», то мы прикладываем к правому контакту дополнительное напряжение, которое больше ширины локализованных состояний, но меньше значения сверхпроводящей щели. Это означает, что для $\varepsilon \lesssim \gamma_l, \gamma_r$ выполняются условия

$$n^l(\varepsilon) = n^r(\varepsilon) = 0, \quad n^r(\varepsilon - V_r) = 1.$$

Ток определяется как

$$\begin{aligned}
I_l(t) = & -\frac{2\gamma_l\gamma_r C \omega_0^2}{\gamma_l + \gamma_r} \frac{1}{\omega_0^2 + 4C^2\gamma_l\gamma_r} \theta(t) + \\
& + \frac{2\gamma_l\gamma_r C \omega_0^2}{(\gamma_l + \gamma_r)\bar{\omega}^2} e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t} \theta(t) - \\
& - i\gamma_l\gamma_r \frac{C^2 \omega_0^2}{\bar{\omega}^2} \frac{e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t + 2i\bar{\omega}t} \theta(t)}{\bar{\omega} + iC(\gamma_l + \gamma_r)} + \\
& + i\gamma_l\gamma_r \frac{C^2 \omega_0^2}{\bar{\omega}^2} \frac{e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t - 2i\bar{\omega}t} \theta(t)}{\bar{\omega} - iC(\gamma_l + \gamma_r)}. \quad (38)
\end{aligned}$$

Мы рассматриваем случай $\gamma_r, \gamma_l \gg \omega_0$ в предположении что ω_0 всегда мало. Но для очень симметричной туннельной связи с выводами мы могли бы иметь $\omega_0^2 \gg (\gamma_r - \gamma_l)^2$. Этот случай выглядит нереалистичным, тем не менее, он демонстрирует осциллирующий токовый сигнал на левом краю:

$$\begin{aligned}
I_l(t) = & -\frac{\omega_0^2}{2C(\gamma_l + \gamma_r)} \times \\
& \times \left[1 - e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t} \right] - \\
& - \left[\frac{\omega_0}{2} \sin(2\omega_0 t) - \frac{C(\gamma_l + \gamma_r)}{2} (1 - \cos(2\omega_0 t)) \right] \\
& \times e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t}. \quad (39)
\end{aligned}$$

Если $\omega_0 \ll |\gamma_r - \gamma_l|$ и $t > 0$, уравнение (38) упрощается

$$\begin{aligned}
I_l(t) = & -\frac{\omega_0^2}{2C(\gamma_l + \gamma_r)} \times \\
& \times 2mm \times \left[1 + \frac{4\gamma_l\gamma_r}{(\gamma_l - \gamma_r)^2} e^{-2C(\gamma_l + \gamma_r)t} \right. \\
& \left. - \frac{(\gamma_l + \gamma_r)}{(\gamma_l - \gamma_r)^2} (\gamma_l e^{-4C\gamma_r t} + \gamma_r e^{-4C\gamma_l t}) \right]. \quad (40)
\end{aligned}$$

(Заметим, что знак минуса означает, что ток течет из r в l .) Для существенно различных скоростей туннелирования, например, $\gamma_r \gg \gamma_l$, временная эволюция ведущего вклада в ток определяется самой медленной скоростью:

$$I_l(t) = -\frac{\omega_0^2}{2C\gamma_r} [1 - e^{-4C\gamma_l t}]. \quad (41)$$

Последняя формула показывает, что если $\gamma_l \rightarrow 0$, то токовый сигнал на другом конце цепочки нарастает очень медленно.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье показано, что транспортные свойства цепочки Китаева конечной длины можно полностью исследовать с помощью обычной техники электронных функций Грина. Для любой нестационарной задачи этот язык, по-видимому, гораздо удобнее языка майорановских фермионов и других методов и позволяет получать точные аналитические результаты. Наши вычисления позволяют связать феноменологические параметры для квазичастиц при квазиклассических расчетах с микроскопическим описанием квазиодномерных сверхпроводников.

Было показано, что стационарный туннельный ток через конечную цепочку всегда определяется наименьшей из скоростей переноса среди параметров $\omega_0^2/(\gamma_l + \gamma_r), \gamma_l, \gamma_r$, если приложенное напряжение меньше сверхпроводящей щели. Для произвольных параметров $\mu < |\Delta| < t$ стационарный ток всегда экспоненциально мал для длинных цепочек. Следует отметить, что для конечной цепочки Китаева, помещенной между двумя внешними контактами-термостатами, не может быть заметного пика при ω_0 в туннельной проводимости. А в случае $\omega_0 = 0$ стационарный ток полностью исчезает.

Также получено поведение туннельного тока, зависящее от времени, после внезапного изменения напряжения смещения в одном из выводов. Было показано, что типичные временные масштабы эволюции туннельного тока определяются в основном скоростями туннелирования γ_l, γ_r из левого и правого краевых участков цепи в соответствующие выводы. Хотя мы представили здесь результаты для идеальной системы, мы можем быть уверены на основе выводов статей [34, 35], что слабый беспорядок не меняет заметно свойства идеальной цепи Китаева. Поэтому только сильный беспорядок может полностью изменить наши результаты.

В заключение заметим, что при рассмотрении систем из набора китаевских цепочек часто строится эффективное описание на основе эффектов кулоновской блокады. Однако такое эффективное описание чувствительно к скоростям переноса заряда, это может быть важно для современных предложений по передаче сигнала или квантовому обмену информацией и ее хранению с использованием цепей Китаева.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-22-00289.

ПРИЛОЖЕНИЕ. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОЛИРОВАННОЙ ЦЕПОЧКИ КИТАЕВА

В этом разделе мы приводим формулы для функций Грина изолированной цепочки Китаева.

Как показано в [20], точное решение для функций Грина бесконечной цепи можно найти как

$$\Gamma_{nm}^{0R}(\omega) = -\frac{1}{4(|\Delta|^2 - t^2)(A_+ - A_-)} \times \\ \times [\chi_+^{|n-m|} \hat{M}_1 - \chi_-^{|n-m|} \hat{M}_2]. \quad (42)$$

Здесь

$$\hat{M}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \mu - 2tA_+}{\sqrt{A_+^2 - 1}} & 2\Delta \text{sign}(n - m) \\ -2\Delta^* \text{sign}(n - m) & \frac{\omega + \mu + 2tA_+}{\sqrt{A_+^2 - 1}} \end{pmatrix},$$

$$\hat{M}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \mu - 2tA_-}{\sqrt{A_-^2 - 1}} & 2\Delta \text{sign}(n - m) \\ -2\Delta^* \text{sign}(n - m) & \frac{\omega + \mu + 2tA_-}{\sqrt{A_-^2 - 1}} \end{pmatrix}.$$

Комплексное значение квадратного корня $\sqrt{A_{\pm}^2 - 1}$ определяется таким образом, что оно имеет разрез на отрезке $A_{\pm} \in (-1, 1)$ и имеет положительные значения при $A_{\pm} > 1$,

$$A_{\pm} = \frac{t\mu \pm |\Delta| \sqrt{\mu^2 + 4(|\Delta|^2 - t^2)} \left(1 - \frac{(\omega + i\delta)^2}{4|\Delta|^2}\right)}{2(|\Delta|^2 - t^2)}, \quad (43)$$

$$\chi_{\pm} = A_{\pm} - \sqrt{A_{\pm}^2 - 1}. \quad (44)$$

Подразумеваем $\delta \rightarrow +0$. Функцию Грина гамильтониана (2) можно записать через функцию Грина бесконечной цепи, используя уравнение Дайсона с возмущением \hat{V} ,

$$\Gamma_{nm}^R(\omega) = \Gamma_{nm}^{0R}(\omega) + \Gamma_{n0}^{0R}(\omega)U\sigma_z\Gamma_{0m}^R(\omega) + \Gamma_{n,N+1}^{0R}(\omega)U\sigma_z\Gamma_{N+1,m}^R(\omega). \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{nm}^R(\omega) &= \Gamma_{nm}^{0R}(\omega) - \Gamma_{n0}^{0R} \times \\ &\times (\omega) (\Gamma_{0,0}^{0R}(\omega) - \Gamma_{0,N+1}^{0R}(\omega)(\Gamma_{N+1,N+1}^{0R}(\omega))^{-1}\Gamma_{N+1,0}^{0R}(\omega))^{-1} \times \\ &\times (\Gamma_{0,m}^{0R}(\omega) - \Gamma_{0,N+1}^{0R}(\omega)(\Gamma_{N+1,N+1}^{0R}(\omega))^{-1}\Gamma_{N+1,m}^{0R}(\omega)) - \\ &- \Gamma_{n,N+1}^{0R}(\omega) (\Gamma_{N+1,N+1}^{0R}(\omega) - \Gamma_{N+1,0}^{0R}(\omega)(\Gamma_{00}^{0R}(\omega))^{-1}\Gamma_{0,N+1}^{0R}(\omega))^{-1} \times \\ &\times (\Gamma_{N+1,m}^{0R}(\omega) - \Gamma_{N+1,0}^{0R}(\omega)(\Gamma_{00}^{0R}(\omega))^{-1}\Gamma_{0m}^{0R}(\omega)). \end{aligned} \quad (46)$$

Элементы матрицы $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ описывают функции Грина конечной цепи, если аргументы удовлетворяют соотношению $0 < n, m < N+1$. Можно непосредственно проверить, что $\Gamma_{nm}^R(\omega) = 0$, если один из аргументов n и m положительный, а другой отрицательный, что дает нам прямое доказательство того, что наша процедура эффективно удаляет узел $n = 0$ из системы. То же самое верно для узла $n = N+1$.

Можно видеть, что функция $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ может иметь набор полюсов при значениях ω , заданных уравнением

$$\det(\Gamma_{00}^{0R}(\omega) - \Gamma_{N+1,0}^{0R}(\omega)(\Gamma_{00}^{0R}(\omega))^{-1}\Gamma_{0,N+1}^{0R}(\omega)) = 0. \quad (47)$$

Поскольку $\Gamma_{nm}^{0R}(\omega)$ не имеет полюсов внутри щели, можно предположить, что решения этого уравнения соответствуют энергиям состояний, локализованных на краях цепочки. Прямая подстановка функций Грина (42) позволяет найти решение для ω при произвольных значениях параметров.

Для полубесконечной цепи, если $N \rightarrow \infty$, ситуация значительно упрощается. Уравнение (47) упрощается до

$$\det(\Gamma_{0,0}^{0R}(\omega)) = 0, \quad (48)$$

и он имеет только одно решение в щели $\omega = 0$. Это решение не возникает, если $|\mu| > 2t$. Этот полюс при $\omega = 0$ существует в функции $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ только если оба n и m положительны или оба отрицательны, для

Если мы решим уравнение (45) для $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ и учтем предел $U \rightarrow \infty$, то мы можем найти точное решение для функций Грина $\Gamma_{nm}^R(\omega)$:

любого набора параметров t, μ, Δ , удовлетворяющего соотношению

$$t^2 > (\mu/2)^2 + \Delta^2,$$

условию, которое разделяет топологически нетривиальную и тривиальную фазы. Это означает, что система, описываемая гамильтонианом (2), имеет два состояния с энергией $\omega = 0$, одно слева, а другое справа от дефекта, разрезающего цепочку на две подсистемы.

Если теперь рассмотреть длинную конечную цепочку длины N , то мы можем записать уравнение для локализованных состояний как

$$\det[\Gamma_{N+1,N+1}^{(X)R}(\omega)] = 0, \quad (49)$$

где $\Gamma_{N+1,N+1}^{(X)R}(\omega)$ — это функция Грина для полубесконечной цепочки,

$$\begin{aligned} \Gamma_{nm}^{(X)R}(\omega) &\equiv \\ &\equiv \Gamma_{nm}^{0R}(\omega) - \Gamma_{n0}^{0R}(\omega) (\Gamma_{0,0}^{0R}(\omega))^{-1} \Gamma_{0,m}^{0R}(\omega). \end{aligned} \quad (50)$$

Поскольку в дальнейшем нас будут интересовать связанные состояния в щели с энергиями, близкими к нулю, вычисления можно упростить за счет следующего факта. При $\omega \rightarrow 0$ значения χ удовлетворяют условию $|\chi_{\pm}| < 1$. Действительно, при $\omega = 0$ уравнение (44) дает

$$\chi_{\pm} = \frac{-\mu \pm i\sqrt{4t^2 - (\mu^2 + 4|\Delta|^2)}}{2(t + |\Delta|)}. \quad (51)$$

Как следствие,

$$|\chi|^2 = \left(\frac{t - |\Delta|}{t + |\Delta|} \right). \quad (52)$$

Это означает, что $|\chi| < 1$ для $t^2 > ((\mu/2)^2 + \Delta^2)$ и $\omega \ll |\Delta|$. Таким образом, величины типа $|\chi|^N$, появляющиеся в функциях Γ_{0N} , являются малыми параметрами для больших N , и в дальнейшем мы будем называть такие величины «экспоненциально малыми», имея в виду экспоненциальное убывание с длиной цепи (или числом узлов).

Расписывая (49) через ω и χ_{\pm}^N , которые мы считаем малыми, как объяснено выше, получаем

$$0 = \det \left[-\hat{\mathbf{I}}\omega \frac{t}{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)} - \begin{pmatrix} 1 & \frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\omega} \frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{2t(4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2)} \times \right. \\ \left. \times (\chi_+^{N+1} - \chi_-^{N+1})^2 \right], \quad (53)$$

где $\hat{\mathbf{I}}$ — единичная матрица. Решение $\omega = 0$ принадлежит полюсу функции Грина, который существует только на полубесконечных участках цепи. Другая пара решений имеет конечные, но малые энергии $\omega = \pm\omega_0$, где

$$\omega_0 = \frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{it\sqrt{4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2}} \times (\chi_+^{N+1} - \chi_-^{N+1}). \quad (54)$$

Здесь мы видим, что это решение удовлетворяет приближениям, которые мы сделали, если $|\chi_{\pm}^{N+1}| \ll 1$. Принимая во внимание (51), условие $t^2 = ((\mu/2)^2 + \Delta^2)$ разделяет две области с осциллирующим и не осциллирующим ω_0 . Если ω_0 пересекает ноль при изменении μ , это означает изменение фермионной четности, как обсуждалось в статье [36].

Главный член разложения функции Грина $\Gamma_{nm}^R(\omega)$ при $\omega \rightarrow \pm\omega_0$, который в квантовой механике описывал бы пространственную структуру волновых функций двух локализованных состояний, принимает следующий вид:

$$\Gamma_{nm}^R(\omega) = -\frac{\omega}{(\omega + i\delta)^2 - (\omega_0)^2} \frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{2t(4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2)} \times \\ \times \left((\chi_+^n - \chi_-^n)(\chi_+^m - \chi_-^m) \begin{pmatrix} 1 & \frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & 1 \end{pmatrix} + (\chi_+^{N+1-n} - \chi_-^{N+1-n})(\chi_+^{N+1-m} - \chi_-^{N+1-m}) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ -\frac{\Delta^*}{|\Delta|} & 1 \end{pmatrix} \right) - \\ - \frac{\omega_0}{(\omega + i\delta)^2 - (\omega_0)^2} \frac{|\Delta|(4t^2 - \mu^2)}{2t(4(t^2 - |\Delta|^2) - \mu^2)} \times \\ \times \left((\chi_+^n - \chi_-^n)(\chi_+^{N+1-m} - \chi_-^{N+1-m}) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta}{|\Delta|} \\ \frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} + (\chi_+^{N+1-n} - \chi_-^{N+1-n})(\chi_+^m - \chi_-^m) \begin{pmatrix} 1 & \frac{\Delta}{|\Delta|} \\ -\frac{\Delta^*}{|\Delta|} & -1 \end{pmatrix} \right). \quad (55)$$

Диагональные элементы Γ_{nn} показывают пространственное распределение плотности в локализованных состояниях. В пределе $\Delta = t$ только Γ_{11} и Γ_{NN} не равны нулю, поскольку (52)

$$\chi_+^n \propto \chi_-^n \propto |t - |\Delta||^{n/2}.$$

В высокосимметричном случае $\mu = 0$ и $|\Delta| \rightarrow t$ энергетические уровни равны

$$\omega_0 = \frac{4|\Delta|t}{t + |\Delta|} \left(\frac{t - |\Delta|}{t + |\Delta|} \right)^{\frac{N}{2}} \times \sin \left(\frac{\pi(N+1)}{2} \right) \rightarrow 0. \quad (56)$$

Как было замечено ранее (см., например, [37]), при нечетном числе узлов ω_0 равняется нулю при произвольных значениях t и Δ .

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Yu. Kitaev, УФН **171**, 131 (2001) [Physics-Usp. **44**, 131 (2001)].
2. В. В. Вальков, М. С. Шустин, С. В. Аксенов и др., УФН **192**, 3 (2022) [Physics-Usp. **65**, 2 (2022)].
3. E. Majorana, Il Nuovo Cimento (1924-1942) **14**, 171 (1937).
4. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov et al., Science **336**, 1003 (2012).
5. M. T. Deng et al., Science **354**, 1557 (2016).
6. H. J. Suominen, M. Kjaergaard, A. R. Hamilton et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 176805 (2017).
7. E. Prada, P. San-Jose, M. W. A. de Moor et al., Nature Rev. Phys. **2**, 575 (2020).
8. D. Aasen, M. Hell, R. V. Mishmash et al., Phys. Rev. X **6**, 031016 (2016).
9. T. Karzig, Y. Oreg, G. Refael, and M. H. Freedman, Phys. Rev. X **6**, 031019 (2016).
10. F. Pientka, L. Jiang, D. Pekker et al., New J. Phys. **15**, 115001 (2013).
11. T. Hyart, B. van Heck, I. C. Fulga et al., Phys. Rev. B **88**, 035121 (2013).
12. L. Jiang, D. Pekker, J. Alicea et al. Phys. Rev. Lett. **107**, 236401 (2011).
13. B. Van Heck, A. R. Akhmerov, F. Hassler et al., New J. Phys. **14**, 035019 (2012).
14. M. Valentini, M. Borovkov, E. Prada et al., Nature **612**, 442 (2022).
15. S. M. Albrecht, A. P. Higginbotham, M. Madsen et al., Nature **531**, 206 (2016).
16. S.D. Sarma, M. Freedman, and C. Nayak, npj Quantum Inf. **1**, 15001 (2015).
17. C. Nayak, S.H. Simon, A. Stern et al., Rev. Mod Phys. **80**, 1083 (2008).
18. I. M. Khaymovich, J. P. Pekola, and A. S. Melnikov, New J. Phys. **19**, 123026 (2017).
19. J. Jin and X.Q. Li, New J. Phys. **24**, 093009 (2022).
20. L. Arrachea, G. S. Lozano, and A. A. Aligia, Phys. Rev. B **80**, 014425 (2009).
21. A. Zazunov, R. Egger, and A. Levy Yeyati, Phys. Rev. B **94**, 014502 (2016).
22. А. И. Русинов, ЖЭТФ **56**, 2047 (1969) [Sov. Phys. JETP **29**, 1101 (1969)].
23. P. I. Arseyev and B. A. Volkov, Sol. St. Comm. **78**, 373 (1991).
24. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 916 (1971).
25. K. Flensberg, Phys. Rev. B **82**, 180516 (2010).
26. S. Smirnov, Phys. Rev. B **105**, 205430 (2022).
27. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **104**, 056402 (2010).
28. Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
29. N. Leumer, M. Grifoni, B. Muralidharan, and M. Marganska, Phys. Rev. B. **103**, 165432 (2021).
30. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 21 (1972).
31. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, УФН **180**, 1197 (2010) [Physics-Usp. **53**, 1151 (2010)].
32. P. A. Ioselevich and M. V. Feigel'man, New J. Phys. **15**, 055011 (2013).
33. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, Б. М. Билинский, ЖЭТФ **166**, 38 (2024).
34. S. N. Thomas, S. D. Sarma, and J. D. Sau, Phys. Rev. B **106**, 174501 (2022).
35. Y. H. Lai, S. D. Sarma, and J. D. Sau Phys. Rev. B **106**, 094504 (2022).
36. S. Hegde et al., New J. Phys. **17**, 053036 (2015).
37. K. Kawabata, R. Kobayashi, N. Wu, and H. Katsura, Phys. Rev. B **95**, 195140 (2017).

SUPRATHERMAL ELECTRON TRANSPORT IN WEAKLY AND STRONGLY MAGNETIZED ASTROPHYSICAL PLASMAS INCLUDING COULOMB COLLISIONAL EFFECTS

Ji-Hoon Ha *

*Korea Space Weather Center, Korea AeroSpace Administration
63025, Jeju, South Korea*

Received July 1, 2024,
revised version August 15, 2024,
Accepted for publication August 20, 2024

This study examines electron transport in astrophysical plasmas mediated by Coulomb collisions and collisionless wave-particle interactions, using a kinetic transport model that incorporates spectral evolutions through these interactions. It investigates the transport of suprathermal electrons via whistler turbulence and the effects of plasma magnetization. Key findings indicate that in strongly magnetized plasmas, diffusion timescales in pitch angle space become saturated at large pitch angles, independent of increasing magnetic field strength. Conversely, in weakly magnetized plasmas, these timescales decrease with decreasing magnetic field strength, enhancing electron transport in velocity space. The study also identifies minimum conditions for resonant scattering, dominated by wave-particle interactions over Coulomb collisions, which depend on Coulomb collision effects and the power-law slope of the whistler turbulence spectrum. These findings have applications in weakly magnetized astrophysical plasmas, from the relatively strong magnetic fields of the interplanetary medium to the very weak magnetic fields of the intracluster medium.

DOI: 10.31857/S0044451025010110

1. INTRODUCTION

Plasma physics is essential for understanding various astrophysical and laboratory phenomena, where electron transport significantly influences the behavior and evolution of plasma systems. In the field of fusion plasma, plasma heating and current drive have been primarily examined to maintain the conditions necessary for the magnetic confinement of plasmas [1]. It has been demonstrated that the propagation and damping of radiofrequency waves, including ion cyclotron, electron cyclotron, and lower-hybrid waves, produce energetic ions and electrons through Landau and cyclotron damping, which leads to current drive generation in the plasma system. Along with such collisionless damping, the collisional relaxation of energetic particles is involved in the evolution of particle distribution in the plasma system. Likewise, collisionless wave-particle interactions and collisional relaxation also play a crucial role in particle transport in astrophysical plasmas. In-

deed, turbulence and the associated plasma instabilities are ubiquitous in astrophysical plasmas, and understanding energy transport through such turbulence is a long-standing problem [2–5].

Plasma phenomena and their dynamical evolution in space and astrophysical plasmas depend on the magnetization, defined as follows:

$$\frac{\omega_{pe}}{\Omega_e} = \frac{\sqrt{4\pi n_0 e^2 / m_e}}{e B_0 / m_e c} \propto \frac{\sqrt{n_0}}{B_0}, \quad (1)$$

where

$$\omega_{pe} = \sqrt{4\pi n_0 e^2 / m_e}, \quad \Omega_e = e B_0 / m_e c$$

stand for the plasma frequency and electron gyrofrequency, respectively, and these quantities depend on the plasma density n_0 and magnetic field B_0 . Thus, the phenomena associated with plasma physics have been examined across a wide range of magnetization factors [6–11]. For instance, the characteristics of plasma instabilities in space plasma depend on the properties of the medium, such as strongly magnetized plasma in the solar atmosphere near the Sun ($\omega_{pe}/\Omega_e < 1$) and weakly magnetized plasmas in the solar wind propagating toward Earth ($\omega_{pe}/\Omega_e > 1$) [6, 7]. Additionally,

* E-mail: hjhspace223@gmail.com

a wide range of ω_{pe}/Ω_e can be adopted to model the pulsar wind propagation from the strongly magnetized magnetosphere of a pulsar to the weakly magnetized pulsar wind nebulae propagating toward the interstellar medium [8, 9]. Furthermore, rigorous theories have been proposed for kinetic turbulence and their roles in particle heating through energy transfer in ambient astrophysical environments, including weakly magnetized media such as interplanetary, interstellar, and intracluster media ($\omega_{pe}/\Omega_e \gg 1$) [10, 11].

Understanding turbulence and dynamical evolution in various astrophysical media is crucial for comprehending particle transport across strongly magnetized to weakly magnetized plasmas, which is essential to examine the nature of plasma distribution in various space and astrophysical plasmas. The mechanisms behind particle transport in space weather have been particularly examined so far. Indeed, suprathermal electrons have been observed by the Parker Solar Probe in the interplanetary medium; these electrons are expected to originate in the solar corona and escape into the interplanetary medium along open magnetic field lines [12, 13]. While particle transport in plasmas has primarily been attributed to Coulomb collisions, observational evidence of suprathermal electrons highlights the importance of collisionless wave-particle interactions. In this regard, recent theoretical studies have proposed a kinetic model based on the Fokker-Planck equation, including wave-particle interactions mediated by plasma turbulence [14–23]. For instance, Kim et al. [14] highlighted that the persistence of a non-Maxwellian distribution in the solar wind could be exhibited through wave-particle interactions due to Langmuir turbulence in the absence of Coulomb collisions (see also [15]). Tang et al. [16] incorporated Coulomb collisional effects along with wave-particle interaction terms into the kinetic model and showed that Coulomb collisions predominantly transport core electrons following a Maxwellian distribution, whereas suprathermal electrons are preferentially accelerated through whistler turbulence. Simulation studies using the particle-in-cell (PIC) method have also shown the formation of suprathermal electrons through whistler turbulence [24, 25]. These findings are consistent with observational evidence of suprathermal electrons in interplanetary space [12, 13].

Despite the considerable progress mentioned above, several gaps persist in our understanding, particularly regarding how these mechanisms operate under different plasma magnetization conditions. Notably, the plasma parameters, including magnetization, differ between interplanetary space and other astrophysical me-

dia such as interstellar and intracluster media. Consequently, plasma phenomena related to particle transport could also differ. While simulation studies using kinetic plasma simulations have demonstrated possible acceleration mechanisms through collisionless shocks and turbulence in various astrophysical media [26–31], it is essential to understand the transport of such accelerated particles in these media to demonstrate the persistence of non-Maxwellian distributions.

In this context, this work aims to improve our understanding of particle transport theory based on the kinetic transport equation and whistler turbulence under different plasma magnetization conditions relevant to various astrophysical media. To achieve this, we adopt a kinetic transport model that incorporates the spectral evolution influenced by both Coulomb collisions and wave-particle interactions, as proposed in previous works [16–19]. By examining how suprathermal electrons are transported through whistler turbulence under varying degrees of plasma magnetization, we extend the applicability of the kinetic transport model to various astrophysical environments. This work reveals distinct behaviors in diffusion timescales for weakly and strongly magnetized plasmas, with significant implications for electron transport dynamics. Additionally, we identify minimum conditions for resonant scattering dominated by wave-particle interactions over Coulomb collisions, highlighting dependencies on Coulomb collision effects and the power-law slope of the whistler turbulence spectrum. This comprehensive approach allows us to explore diffusion timescales in both velocity and pitch angle space, providing new insights into the underlying processes governing electron transport in plasmas.

2. DESCRIPTION OF THE KINETIC MODEL

The evolution of the electron velocity distribution function in astrophysical environments has been examined using the kinetic transport equation [16–19]. The electromagnetic interaction in a typical astrophysical environment includes the electric force and the Lorentz force, which are described as follows:

$$\mathbf{a} = -\frac{e\mathbf{E}}{m_e} - \frac{e}{m_e}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \mathbf{a}_r(\mathbf{r}) + \mathbf{a}_L. \quad (2)$$

Here, e and m_e are the electric charge and the mass of electrons, and \mathbf{E} and \mathbf{B} denote the electric and magnetic fields, respectively. $\mathbf{a}_r(\mathbf{r})$ is the radial component of the acceleration due to the electric force, whereas \mathbf{a}_L is the non-radial component due to the Lorentz force. Using the acceleration \mathbf{a} due to the external forces along

with the terms responsible for Coulomb collisions and wave-particle interactions of kinetic turbulence, the kinetic transport equation can be described as follows:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}})f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}})f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} + \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{wp}. \quad (3)$$

Here, the electron velocity distribution function is expressed in the position (\mathbf{r}), velocity (\mathbf{v}) and time (t) domains, and $(\delta f/\delta t)_{cc}$ and $(\delta f/\delta t)_{wp}$ include the effects of Coulomb collisions and kinetic turbulence, respectively. In the coordinates of the radial distance r , the velocity v , and the parameter including the pitch angle θ between the velocity and magnetic field vectors ($\mu \equiv \cos \theta$), Equation (3) becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\mu \frac{\partial f}{\partial r} + a_r(r) \left(\mu \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{(1-\mu^2)}{v} \frac{\partial f}{\partial \mu} \right) + \frac{v}{r}(1-\mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} = \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} + \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{wp}. \quad (4)$$

The Coulomb collisions with Maxwellian backgrounds of electrons and protons have been employed in the solar wind environments [16]. The term associated with the Coulomb collisions [32] can be expressed as:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} = & c_{v,e} \left\{ \left[\operatorname{erf}\left(\frac{v}{v_{th,e}}\right) - G\left(\frac{v}{v_{th,e}}\right) \right] \times \right. \\ & \times \frac{1}{2v^3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1-\mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right] + \\ & + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[G\left(\frac{v}{v_{th,e}}\right) v \frac{\partial f}{\partial v} \right] + \\ & \left. + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{2v^2}{v_{th,e}^2} G\left(\frac{v}{v_{th,e}}\right) f \right] \right\} + \\ & + c_{v,p} \left\{ \left[\operatorname{erf}\left(\frac{v}{v_{th,p}}\right) - G\left(\frac{v}{v_{th,p}}\right) \right] \times \right. \\ & \times \frac{1}{2v^3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1-\mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right] + \\ & + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[G\left(\frac{v}{v_{th,p}}\right) v \frac{\partial f}{\partial v} \right] + \\ & \left. + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{2v^2}{v_{th,p}^2} \frac{m_e}{m_p} G\left(\frac{v}{v_{th,e}}\right) f \right] \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

where m_p/m_e is the proton-to-electron mass ratio and $v_{th,e}$ and $v_{th,p}$ are the thermal velocities of the background Maxwellian electrons and protons. $\operatorname{erf}(x)$ and $G(x)$ are the error function and the Chandrasekhar

function, respectively. The collision frequencies corresponding to the collisions with the Maxwellian background electrons ($c_{v,e}$) and protons ($c_{v,p}$) are given by:

$$c_{v,e} = \frac{4\pi n_0 e^4 \ln \Lambda}{m_e^2}, \quad (6)$$

$$c_{v,p} = \frac{4\pi n_0 e^4 \ln \Lambda}{m_p^2}, \quad (7)$$

where n_0 and $\ln \Lambda$ are the plasma density and the Coulomb logarithm.

To model the terms for wave-particle interaction, we consider the resonant scattering of electrons by right-handed polarized whistler waves as a main wave-particle interaction mechanism in the turbulent plasma system. Considering the cyclotron resonance of electrons with waves propagating parallel to the guiding magnetic field \mathbf{B}_0 , the resonant particles satisfy the following condition:

$$\omega_r(k) = v\mu k_{\parallel} + n\Omega_e, \quad (8)$$

where ω_r and k are the oscillatory wave frequency and the wavenumber, respectively, and $\Omega_e = |e|B_0/m_e c$ is the electron gyrofrequency. The integer $n \neq 0$ must be finite for cyclotron resonance through the parallel waves. In the whistler regime ($\omega_r < \Omega_e$), the magnetic power spectrum [18, 22] can be described as follows:

$$P_B(k) = A \frac{c}{\Omega_e} \left| \frac{kc}{\Omega_e} \right|^{-s}, \quad (9)$$

where A is the normalization constant, and the spectral index s is expected not to exceed 2 [22]. The evolution of the electron distribution function due to wave-particle interaction through whistler turbulence [16–19] can be expressed as

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{wp} = & \frac{\partial}{\partial \mu} \left(D_{\mu\mu} \frac{\partial f}{\partial \mu} + \frac{1}{m_e} D_{\mu v} \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \\ & + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(v^2 \left(\frac{1}{m_e} D_{\mu v} \frac{\partial f}{\partial \mu} + \frac{1}{m_e^2} D_{vv} \frac{\partial f}{\partial v} \right) \right). \quad (10) \end{aligned}$$

The diffusion tensor for nonrelativistic electrons is expressed as:

$$\bar{D}_{vv} \equiv \frac{D_{vv}}{\Omega_e(m_e c)^2} = \frac{\pi A}{3 a} \left(\frac{\beta |\mu|}{a} \right)^{\frac{s-1}{3}} (1-\mu^2), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \bar{D}_{\mu v} & \equiv \frac{D_{\mu v}}{\Omega_e(m_e c)} = \frac{D_{v\mu}}{\Omega_e(m_e c)} = \\ & = -\frac{\pi A}{3 a} \left[\frac{\mu}{|\mu|} \left(\frac{\beta |\mu|}{a} \right)^{\frac{s-2}{3}} + \frac{\mu}{\beta} \left(\frac{\beta |\mu|}{a} \right)^{\frac{s-1}{3}} \right] (1-\mu^2), \quad (12) \end{aligned}$$

$$\bar{D}_{\mu\mu} \equiv \frac{D_{\mu\mu}}{\Omega_e} = \frac{\pi A}{3a} \times \left[\left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-3}{3}} + 2 \frac{\mu}{|\mu|} \frac{\mu}{\beta} \left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-2}{3}} + \left(\frac{\mu}{\beta} \right)^2 \left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-1}{3}} \right] (1 - \mu^2). \quad (13)$$

Here, we used dimensionless parameters, $\beta = v/c$ and $a = \frac{\omega_{pe}^2}{\Omega_e^2}$ with the plasma frequency $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi n_0 e^2 / m_e}$. To consider both weakly magnetized plasmas such as interplanetary, interstellar, and intracluster media ($a \gg 1$) and strongly magnetized plasmas near the stellar magnetosphere ($a < 1$), we examine the properties of wave-particle interactions mediated by whistler turbulence over a wide range of parameter a .

In the kinetic model described by Equation (4), the detailed evolution mediated by Coulomb collisions and wave-particle interactions depends on the initial electron distribution. The electron distribution of thermal plasma is typically modeled as Maxwellian, given by:

$$f_{th,e}(v) = \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_{th,e}^3} \exp \left[- \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right)^2 \right]. \quad (14)$$

While the Maxwellian distribution is suitable for describing the medium in the absence of nonlinear processes such as plasma and magnetohydrodynamic (MHD) waves, shocks, and turbulence, it has been demonstrated that plasma processes associated with such phenomena can accelerate particles. This particle energization results in a distribution that deviates from Maxwellian, known as the kappa distribution [33–35]. The electron kappa distribution is defined as:

$$f_{\kappa,e}(v) = \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_{th,e}^3} \frac{\Gamma(\kappa + 1)}{(\kappa - 3/2)^{3/2} \Gamma(\kappa - 1/2)} \times \left[1 + \frac{1}{(\kappa - 3/2)} \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right)^2 \right]^{-(\kappa+1)}, \quad (15)$$

where $\Gamma(x)$ is the Gamma function and the parameter κ determines the slope of the suprathermal distribution. For $v \gg v_{th,e}$, the kappa distribution follows a power-law form,

$$f_{\kappa,e}(v) \propto v^{-2(\kappa+1)}.$$

A smaller value of κ results in a flatter particle distribution, whereas a larger value of κ makes the kappa distribution closer to Maxwellian. In the subsequent section, we explore how the initial slope of the electron distribution function influences electron transport

through whistler turbulence, taking into account the dependence on magnetization.

It is noteworthy that the nature of plasma turbulence and wave-particle interaction mediated by such turbulence could be substantially different from the interpretation obtained through linear theory [36, 37]. Specifically, the effects of nonlinear processes on energy dissipation by whistler waves have been examined through PIC simulations [38, 39]. According to the results of these numerical simulations, the significance of nonlinear damping of whistler waves depends on the fluctuation energy of the turbulence and the magnetization of the plasma system [38]. In weakly magnetized plasma, linear damping dominates over nonlinear damping, indicating that the theory developed in the linear regime could be applicable for examining wave-particle interaction through whistler turbulence. In strongly magnetized plasma, when the turbulent fluctuation (δB) is sufficiently weak (i.e., $\delta B \leq B_0$), linear theory could be applicable. In this regard, the kinetic model in this work could be suitable for weak turbulence systems in space and astrophysical environments. For systems with strong turbulence ($\delta B \geq B_0$), nonlinear processes should be taken into account in the model, which is beyond the scope of this paper.

3. ELECTRON TRANSPORT THROUGH WAVE-PARTICLE INTERACTION AND ITS DEPENDENCE ON THE MAGNETIZATION OF THE PLASMA SYSTEM

Firstly, we examine the acceleration timescales through whistler turbulence and their dependence on the magnetic field strength using the three diffusion coefficients. The acceleration timescales can be derived as follows:

$$\frac{\tau_{vv}}{\Omega_e^{-1}} \equiv \frac{\gamma_e^2 m_e^2 v^2}{\Omega_e^{-1} D_{vv}} = \frac{3a}{A\pi} \beta^2 \left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{1-s}{3}} (1 - \mu^2)^{-1}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tau_{\mu v}}{\Omega_e^{-1}} &\equiv \left| \frac{\gamma_e m_e v}{\Omega_e^{-1} D_{\mu v}} \right| = \\ &= \frac{3a}{A\pi} \beta \left| \frac{\mu}{|\mu|} \left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-2}{3}} + \frac{\mu}{\beta} \left(\frac{|\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-1}{3}} \right|^{-1} \times \\ &\quad \times (1 - \mu^2)^{-1}, \quad (17) \end{aligned}$$

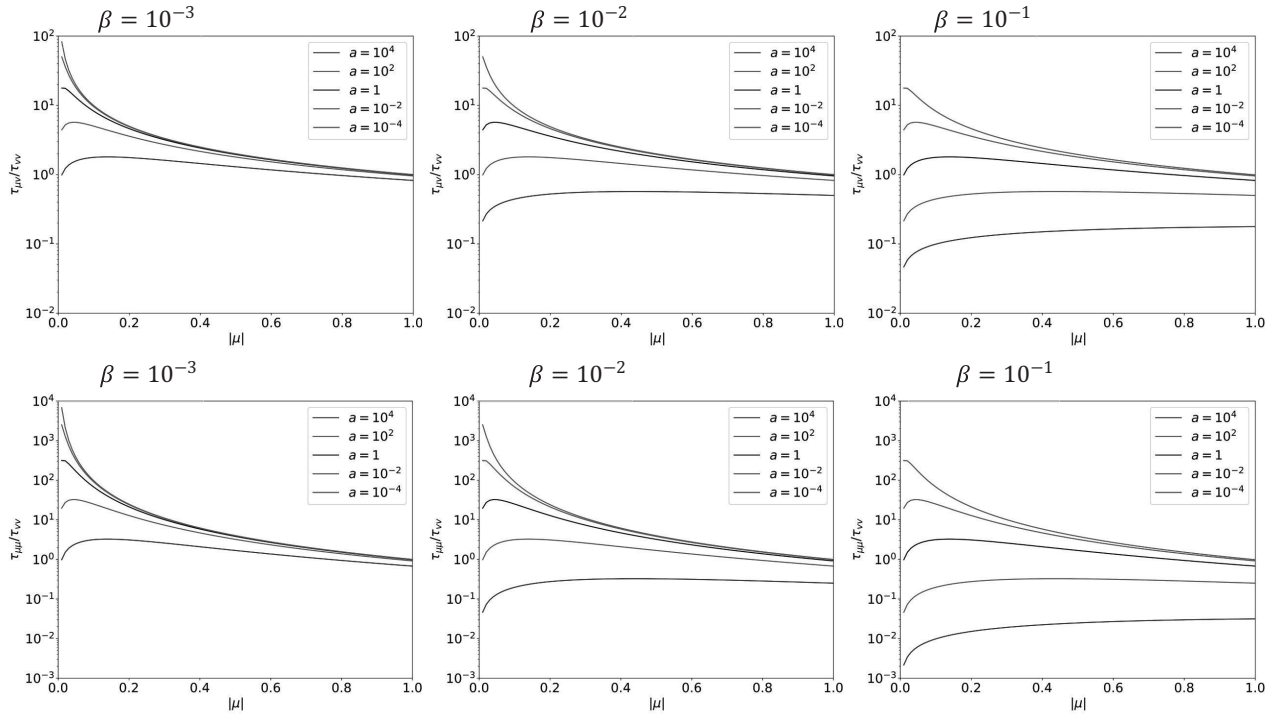


Fig. 1. Comparison of $\tau_{\mu\mu}/\tau_{vv}$ (upper panels) and $\tau_{\mu\mu}/\tau_{vv}$ (lower panels) across parameter space. The plots depict variations with respect to electron velocity β ranging from 10^{-3} to 10^{-1} , and magnetization parameter a spanning from 10^{-4} to 10^4 . Larger values of a indicate weakly magnetized plasmas, whereas smaller values denote strongly magnetized plasma

$$\begin{aligned} \frac{\tau_{\mu\mu}}{\Omega_e^{-1}} &\equiv \left| \frac{1}{\Omega_e^{-1} D_{\mu\mu}} \right| = \\ &= \frac{3a}{A\pi} \left| \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-3}{3}} + \frac{2\mu}{|\mu|} \frac{\mu}{\beta} \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-2}{3}} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\mu}{\beta} \right)^2 \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{\frac{s-1}{3}} \right|^{-1} (1 - \mu^2)^{-1}, \quad (18) \end{aligned}$$

where γ_e is the Lorentz factor, which is approximately 1 for nonrelativistic particles. To assess the relative importance of pitch angle scattering, the following ratios were calculated:

$$\frac{\tau_{\mu v}}{\tau_{vv}} = \left| \frac{\beta\mu}{|\mu|} \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-\frac{1}{3}} + \mu \right|^{-1}, \quad (19)$$

$$\frac{\tau_{\mu\mu}}{\tau_{vv}} = \left| \beta^2 \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-\frac{2}{3}} + \frac{2\beta\mu^2}{|\mu|} \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-\frac{1}{3}} + \mu^2 \right|^{-1}. \quad (20)$$

In a strongly magnetized plasma ($a \rightarrow 0$), the ratios simplify to:

$$\frac{\tau_{\mu v}}{\tau_{vv}} \rightarrow |\mu|^{-1}, \quad \frac{\tau_{\mu\mu}}{\tau_{vv}} \rightarrow |\mu|^{-2}, \quad (21)$$

indicating that the relative importance of diffusion in pitch angle space is independent of the particle velocity

β and magnetic field strength parametrized by a once the particles satisfy the resonant condition. Given that the pitch angle parameter satisfies $|\mu| < 1$, the following relations hold true in strongly magnetized plasmas:

$$\tau_{vv} < \tau_{\mu v} < \tau_{\mu\mu}. \quad (22)$$

In weakly magnetized plasmas ($a \gg 1$), however, the ratios of these characteristic timescales may vary depending on the particle velocity β and magnetic field strength a .

Fig. 1 shows $\tau_{\mu v}/\tau_{vv}$ and $\tau_{\mu\mu}/\tau_{vv}$ as functions of electron velocity β and magnetization a . A few points were noted: (1) In weakly magnetized plasmas ($a \gg 1$), diffusion processes in the pitch angle space become prominent, whereas a saturated behavior is observed for particle acceleration in sufficiently strong magnetic fields ($a \ll 1$). (2) The dependence on magnetic field strength is more pronounced for accelerating electrons with higher β . Particularly, panels (a) and (d) show that $\tau_{\mu v}/\tau_{vv}$ and $\tau_{\mu\mu}/\tau_{vv}$ exhibit similar asymptotic behaviors for small β and large pitch angles $|\mu| > 0.5$, irrespective of a . Conversely, panels (b), (c), (e), and (f) illustrate that the effects of magnetic field strength on pitch angle scattering are more significant for electrons with larger β . (3) In strongly magnetized plasmas

($a < 1$), $\tau_{\mu v}$ and $\tau_{\mu\mu}$ increase as the pitch angle $|\mu|$ decreases, whereas the opposite behavior is observed in weakly magnetized plasmas ($a > 1$). This indicates that wave-particle interactions are influenced by the magnetic field strength of the background medium.

Next, we examine the conditions under which the acceleration timescales are dominated by wave-particle interactions over Coulomb collisions. Assuming fixed background temperatures (constant $v_{th,e}$ and $v_{th,p}$), these regimes depend on the magnetic field strength and the initial distribution of suprathermal electrons. Considering the diagonal terms in $(\delta f/\delta t)_{cc}$ and $(\delta f/\delta t)_{wp}$ for velocity space diffusion, we have the following expressions:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} \approx & c_{v,e} \left\{ \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[G \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right) v \frac{\partial f}{\partial v} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{2v^2}{v_{th,e}^2} G \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right) f \right] \right\} + \\ & + c_{v,p} \left\{ \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[G \left(\frac{v}{v_{th,p}} \right) v \frac{\partial f}{\partial v} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{2v^2}{v_{th,p}^2} \frac{m_e}{m_p} G \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right) f \right] \right\}, \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{wp} \approx & \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[v^2 \left(\frac{1}{m_e^2} D_{vv} \frac{\partial f}{\partial v} \right) \right] = \\ = & \frac{1}{v^2} \left[\frac{2v}{m_e^2} D_{vv} \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\partial D_{vv}}{\partial v} \frac{v^2}{m_e^2} \frac{\partial f}{\partial v} + \right. \\ & \left. + \frac{v^2}{m_e^2} D_{vv} \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right]. \quad (24) \end{aligned}$$

For $v \gg v_{th,e}$, the Chandrasekhar function can be approximated as $G(v/v_{th,e}) \approx (v/v_{th,e})^{-2}/2$ and Equation (23) simplifies to:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} \approx & c_{v,e} \left\{ \frac{1}{v^2} \frac{\partial f}{\partial v} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 \left[-\frac{1}{v^2} \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{1}{v} \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right] \right\} + \\ & + c_{v,p} \left\{ \frac{1}{v^2} \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial f}{\partial v} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 \left[-\frac{1}{v^2} \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{1}{v} \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right] \right\}. \quad (25) \end{aligned}$$

Assuming the suprathermal electrons follow a kappa distribution function, the distribution of high-energy

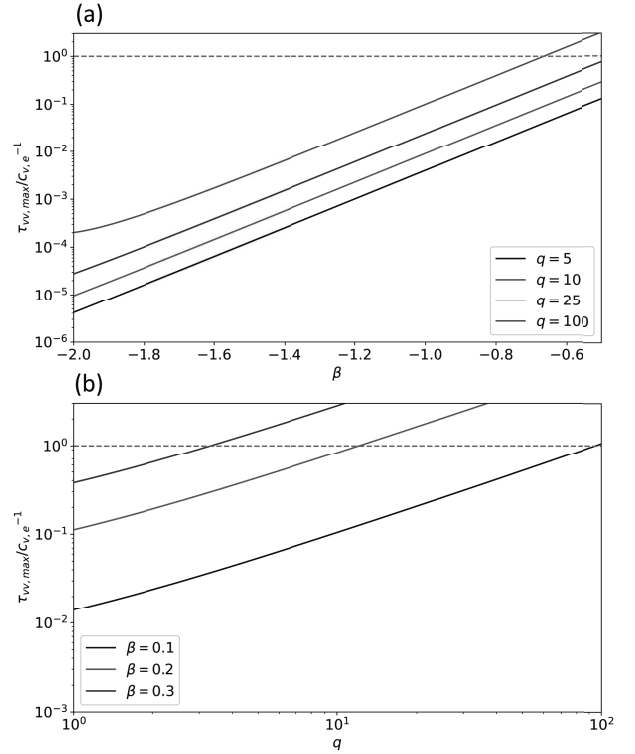


Fig. 2. *a* — Maximum acceleration timescale, $\tau_{vv,max}$, plotted against β for four different q values. *b* — $\tau_{vv,max}$ shown for three different β values across various q values. The electron thermal velocity is set as $v_{th,e}/c = 10^{-3}$. Gray lines indicate $\tau_{vv,max}/c_{v,e}^{-1} = 1$

electrons with $v \gg v_{th,e}$ approximates to a power-law tail, $f \propto v^{-q}$. The derivatives of f are expressed as follows:

$$\frac{\partial f}{\partial v} = -qv^{-1}f, \quad (26)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} = q(q+1)v^{-2}f. \quad (27)$$

Using Equations (26) and (27), Equations (24) and (25) can be rewritten as

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{cc} \approx & c_{v,e} \left\{ -\frac{qf}{v^3} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 \left[\frac{q(q+2)f}{v^3} \right] \right\} + \\ & + c_{v,p} \left\{ -\frac{m_e}{m_p} \frac{qf}{v^3} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 \left[\frac{q(q+2)f}{v^3} \right] \right\}, \quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{wp} \approx & \frac{1}{v^2} \left[\frac{q(q-1)D_{vv}}{m_e^2} f - \right. \\ & \left. - \frac{qvD_{vv}(s-1)\beta^{(s-4)/3}}{3m_e^2c} f \right]. \quad (29) \end{aligned}$$

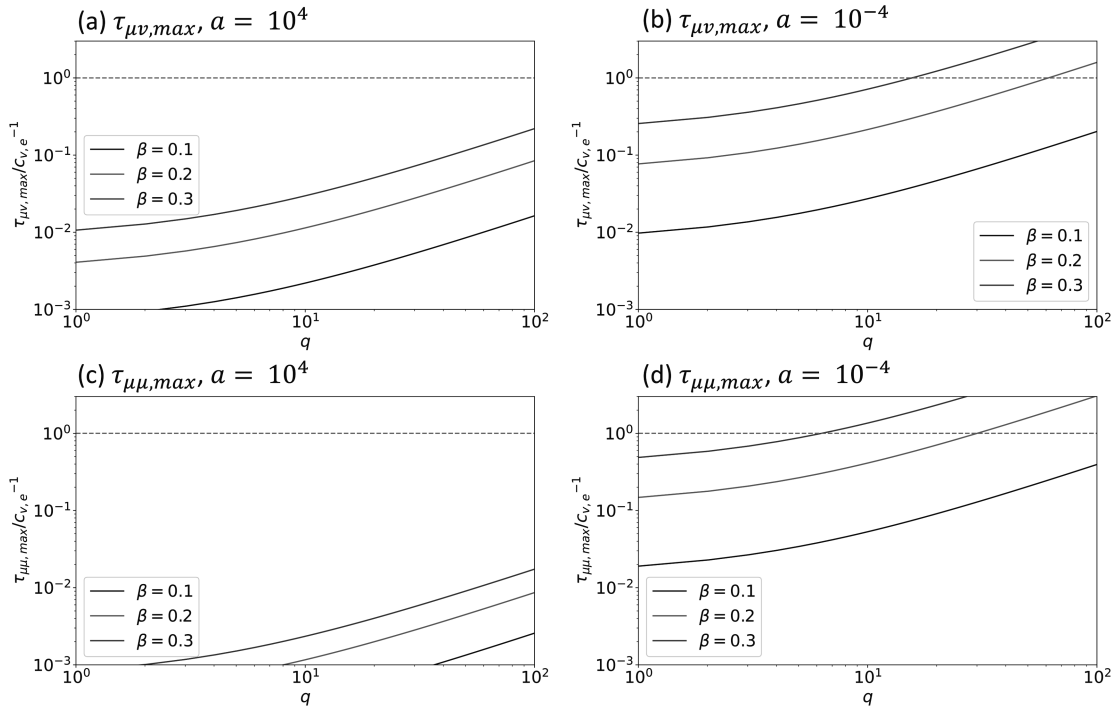


Fig. 3. $\tau_{\mu\nu, \max}$ and $\tau_{\mu\mu, \max}$ for weakly (left panels) and strongly (right panels) magnetized plasmas. Here, the electron thermal velocity is assumed as $v_{th,e}/c = 10^{-3}$, and the gray lines display the value $\tau_{\max}/c_{v,e}^{-1} = 1$

Electrons gain energy when

$$(\delta f/\delta t)_{cc} + (\delta f/\delta t)_{wp} \geq 0.$$

In this case, we obtain the following inequality for D_{vv} :

$$D_{vv} \geq \left[\frac{q(q-1)}{m_e^2 v^2} - \frac{q(s-1)\beta^{(s-4)/3}}{3m_e^2 v c} \right]^{-1} \times \\ \times \left\{ c_{v,e} \left[\frac{q}{v^3} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 \left(\frac{q(q+2)}{v^3} \right) \right] + \right. \\ \left. + c_{v,p} \left[\frac{m_e}{m_p} \frac{q}{v^3} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 \left(\frac{q(q+2)}{v^3} \right) \right] \right\}. \quad (30)$$

Using the inequality (30), we examine how the slope of the initial distribution of suprathermal electrons could influence the relative importance between Coulomb collisions and wave-particle interactions. For nonrelativistic electrons where $v_{th,e}/c \ll \beta \ll 1$ (or the Lorentz factor $\gamma_e \approx 1$), the acceleration timescale (τ_{vv}) satisfies

$$\tau_{vv} \equiv \frac{\gamma_e^2 m_e^2 \beta^2}{D_{vv}} \leq \\ \leq c_{v,e}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1} + \\ + c_{v,p}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| \frac{m_e}{m_p} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1}. \quad (31)$$

To explore the dependence on the slope of the suprathermal electron distribution, we estimate the maximum acceleration timescales for the two different regimes as follows:

$$\tau_{vv, \max} \approx \begin{cases} 4\beta^3 (c_{v,e}^{-1} + \frac{m_e}{m_p} c_{v,p}^{-1}), & \text{for } q = 5, \\ 2\beta^3 \left[c_{v,e}^{-1} \left(\frac{v}{v_{th,e}} \right)^2 + c_{v,p}^{-1} \left(\frac{v}{v_{th,p}} \right)^2 \right], & \text{for } q \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (32)$$

Because electron velocities satisfy $v/v_{th,e} \gg 1$ and $v/v_{th,p} \gg 1$, the maximum acceleration timescale is much larger when $q \rightarrow \infty$. This indicates the evolution of the electron distribution function with a larger q more effectively depends on Coulomb collisions, and such a distribution is likely to resemble a Maxwellian. It is understandable that wave-particle interactions with sufficiently large q are inefficient due to the absence of a sufficient number of resonant particles. Indeed, acceleration timescales become longer regardless of electron velocity for larger q (panel *a* of Fig. 2), and these effects are more pronounced for suprathermal electrons with higher β .

While the analysis in this section has focused on the diagonal terms of the diffusion tensor, it has been

demonstrated that the off-diagonal terms, particularly those involving diffusion in pitch angle scattering, are significant in weakly magnetized plasmas. Using equations (19) and (20), we can roughly estimate the maximum values of $\tau_{\mu\nu}$ and $\tau_{\mu\mu}$ for wave-particle interactions. Applying the inequality (31) to Equations (19) and (20), we obtain

$$\tau_{\mu\nu} \leq \left\{ c_{v,e}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1} + c_{v,p}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| \frac{m_e}{m_p} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1} \right\} \times \left| \frac{\beta\mu}{|\mu|} \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-1/3} + \mu \right|^{-1}, \quad (33)$$

$$\tau_{\mu\mu} \leq \left\{ c_{v,e}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,e}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1} + c_{v,p}^{-1} \beta^3 (q-1) \left| \frac{m_e}{m_p} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_{th,p}}{v} \right)^2 (q+2) \right|^{-1} \right\} \times \left| \beta^2 \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-2/3} + \frac{2\beta\mu^2}{|\mu|} \left(\frac{\beta|\mu|}{a} \right)^{-1/3} + \mu^2 \right|^{-1}. \quad (34)$$

Figure 3 shows the behavior of the two characteristic timescales $\tau_{\mu\nu}$ and $\tau_{\mu\mu}$ across a wide range of slope parameters q and electron velocities β . In weakly magnetized plasmas ($a = 10^4$), shown in the left panels of Fig. 3, wave-particle interactions can effectively transport electrons with softer distribution slopes due to enhanced diffusion in pitch angle space. This enhancement occurs even in scenarios where $\tau_{vv} > c_{v,e}^{-1}$, as $\tau_{\mu\mu} < \tau_{\mu\nu} \ll c_{v,e}^{-1}$ can be satisfied. Conversely, in strongly magnetized plasmas ($a = 10^{-4}$), shown in the right panels of Fig. 3, diffusion in pitch angle space does not significantly enhance efficient transport through wave-particle interactions when collisional effects dominate ($\tau_{vv} > c_{v,e}^{-1}$), as $\tau_{vv} < \tau_{\mu\nu} < \tau_{\mu\mu}$.

4. CYCLOTRON RESONANCE OF SUPRATHERMAL ELECTRONS AND NATURE OF WHISTLER WAVES

In this section, we derive the conditions for the minimum velocity of resonant electrons and the characteristics of whistler waves corresponding to wave-particle interaction. The criteria described in this section encompass the characteristics of the turbulent power spectrum, such as its power-law slope, and

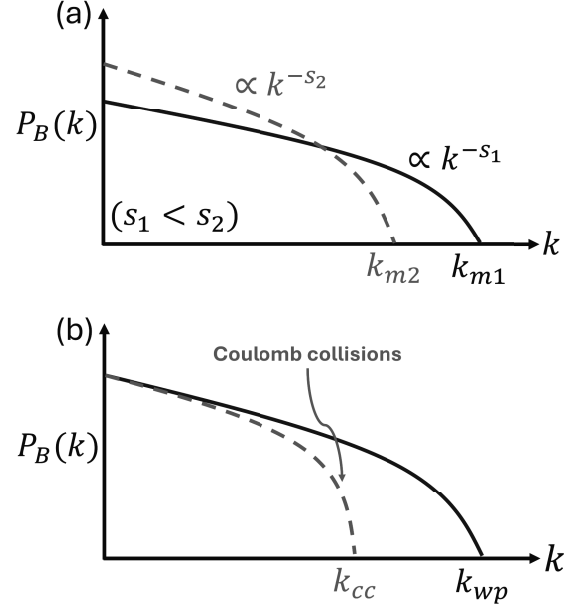


Fig. 4. *a* — Schematic diagrams illustrating whistler turbulence spectra with two different power-law slopes (s_1, s_2). Assuming constant energy transport through whistler turbulence, the maximum wavenumber for a steeper (s_2) spectrum may be smaller than that for a flatter spectrum (s_1) ($k_{m2} < k_{m1}$). *b* — Schematic diagrams demonstrating the influence of Coulomb collisions on turbulent energy transport. Coulomb collisions hinder energy transfer to smaller scales, potentially resulting in a smaller maximum wavenumber (k_{cc}) compared to scenarios without Coulomb collisions (k_{wp})

the effects of Coulomb collisions, as depicted in the schematic figure (see Fig.4). Assuming that the energy transferred through whistler turbulence remains constant across spectra with arbitrary slopes, the maximum wavenumber of a flatter spectrum could be larger than that of a steeper spectrum. Additionally, Coulomb collision effects may suppress energy transport to smaller scales, thereby allowing for a larger maximum wavenumber with stronger Coulomb collisional effects. Such wave characteristics could influence particle transport through turbulence by determining the minimum momentum of electrons required for wave-particle interactions.

Considering only the electron collision term, the minimum velocity criterion can be derived using the inequality (31) as follows:

$$\beta \geq \left(\frac{3}{\pi A} (1 - \mu^2)^{-1} |\mu|^{(1-s)/3} \left(\frac{v_{th,e}}{c} \right)^3 \times \right. \\ \left. \times (q-1) \left(\frac{\Omega_e^{-1}}{\omega_{pe}^{-1}} \right)^{(2s+1)/3} \left(\frac{c_{v,e}^{-1}}{v_{th,e}^{-3} \omega_{pe}^{-1}} \right)^{-1} \right)^{3/(s+2)}. \quad (35)$$

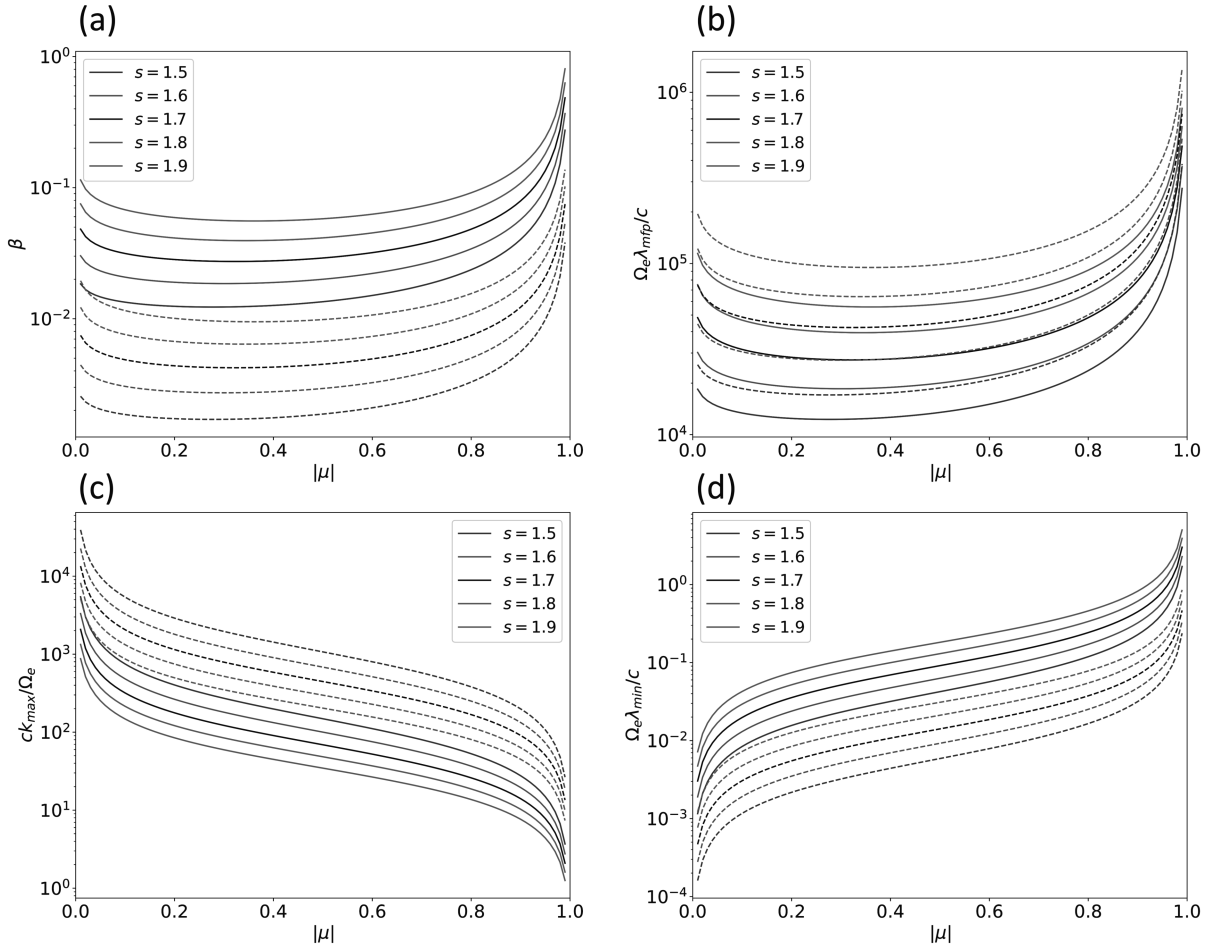


Fig. 5. *a* — Minimum electron velocity, *b* — minimum collisional mean free path, *c* — maximum wavenumber, and *d* — minimum wavelength as functions of pitch angle μ . Solid lines correspond to $c_{v,e}^{-1}/\Omega_e^{-1} = 10^6$, while dashed lines correspond to $c_{v,e}^{-1}/\Omega_e^{-1} = 10^7$. The results are shown for $q = 5$ as an example

Here, for simplicity, we consider only electron-electron collisions since the collisional timescales satisfy $c_{v,e}^{-1} \ll c_{v,p}^{-1}$. Clearly, more electrons with lower velocities can be energized through wave-particle interactions when collisional timescales are longer. While the minimum velocity increases as the magnetic field strength decreases (or, Ω_e^{-1} increases), we interpret that these effects could be minor when considering regimes dominated by wave-particle interactions ($\Omega_e^{-1} \ll c_{v,e}^{-1}$). Additionally, a steeper initial slope of the suprathermal electron distribution q leads to a larger minimum velocity, indicating that transport of suprathermal electrons is less likely when q is sufficiently large.

For low-frequency whistler waves ($\omega_r \ll \Omega_e$), the wavenumber k_{\parallel} and wavelength λ_{\parallel} for scattering particles are derived as follows:

$$k_{\parallel} \approx \frac{n\Omega_e}{v\mu}, \quad \lambda_{\parallel} \equiv \frac{2\pi}{k_{\parallel}} \approx \frac{2\pi v\mu}{n\Omega_e}. \quad (36)$$

From the inequality (35), we obtain the maximum wavenumber $k_{\parallel,\max}$ and the minimum wavelength $\lambda_{\parallel,\min}$ for wave-particle interactions:

$$\frac{ck_{\parallel,\max}}{\Omega_e} \approx \frac{n}{\mu} \left[\frac{3}{\pi A} (1 - \mu^2)^{-1} |\mu|^{(1-s)/3} \left(\frac{v_{th,e}}{c} \right)^3 \times \right. \\ \left. \times (q - 1) \left(\frac{\Omega_e^{-1}}{\omega_{pe}^{-1}} \right)^{(2s+1)/3} \left(\frac{c_{v,e}^{-1}}{v_{th,e}^{-3} \omega_{pe}^{-1}} \right)^{-1} \right]^{-3/(s+2)}, \quad (37)$$

$$\lambda_{\parallel,\min} \approx \frac{2\pi}{k_{\parallel,\max}}. \quad (38)$$

We also consider the minimum collisional length defined as

$$\frac{\Omega_e \lambda_{\text{mfp, min}}}{c} \approx \beta_{\text{min}} \frac{c_{v,e}^{-1}}{\Omega_e^{-1}}. \quad (39)$$

In the criterion (37), the maximum wavenumber decreases as the initial slope of the electron distribution function (q) increases. This indicates that the wavenumber range of wave-particle interactions could be reduced when there are fewer suprathermal electrons (i.e., the spectrum is steeper with larger q).

According to the conditions for resonant scattering and efficient wave-particle interactions, we explore the minimum electron velocity and wave properties relevant to wave-particle interactions across varying power-law slopes of turbulent spectra. The maximum wavenumber $k_{\parallel, \text{max}}$ and minimum wavelength $\lambda_{\parallel, \text{min}}$, derived using the inequality (31) that includes Coulomb collisions and wave-particle interactions, align with the physical insights demonstrated in Fig. 4. Specifically, $k_{\parallel, \text{max}}$ decreases and $\lambda_{\parallel, \text{min}}$ increases as the power-law slope of the turbulent spectra increases. This suggests that turbulence with a flatter spectrum is more efficient at transporting particles. Additionally, as shown by the solid lines in Fig. 5, relatively strong Coulomb collisions can suppress particle transport by reducing $k_{\parallel, \text{max}}$. In contrast, weakly collisional plasmas (represented by dashed lines in Fig. 5) exhibit greater $k_{\parallel, \text{max}}$ values. It is important to note that this analysis generally applies to weakly collisional plasmas where $\lambda_{\parallel, \text{min}} \ll \lambda_{\text{mfp, min}}$.

5. SUMMARY AND DISCUSSION

In this work, we demonstrate how wave-particle interactions through whistler turbulence differ between weakly and strongly magnetized plasmas. In strongly magnetized plasmas (characterized by $a = \omega_{pe}^2 / \Omega_e^2 \ll 1$), the diffusion timescales at large pitch angles ($|\mu| > 0.5$) exhibit saturation for sufficiently small values of a , indicating that strong magnetic fields effectively regulate particle diffusion in pitch angle space. In weakly magnetized plasmas (where $a \gg 1$), on the other hand, large-angle scattering can be enhanced due to the increased magnetization factor a . This enhancement suggests that electron transport via wave-particle interactions may dominate over Coulomb collisions, facilitated by enhanced diffusion in pitch angle space. Additionally, incorporating Coulomb collision effects, we provide conditions for electron transport through whistler turbulence, including the minimum electron velocity

and wavelength required for resonant scattering. These findings are broadly applicable to weakly collisional astrophysical plasmas, offering insights into the range of resonant velocities and maximum wavenumbers for wave-particle interactions across a wide range of magnetic field strengths parametrized by a . In such environments, weakly magnetized mediums benefit from efficient transport via wave-particle interactions, particularly when suprathermal particles are present.

We further comment on the significance of investigating particle transport through plasma turbulence in space and astrophysical media. The generation of suprathermal particles is feasible through collisionless shocks or plasma turbulence in various astrophysical environments, with multi-wavelength emissions serving as observational evidence of particle acceleration. While studies on electron transport via whistler turbulence have predominantly focused on non-Maxwellian electron distributions in solar wind environments, similar investigations in diverse astrophysical contexts are warranted. For example, research has shown that velocity anisotropy in interstellar and intracluster media can induce whistler waves [27, 40, 41], potentially maintaining non-Maxwellian electron distributions within localized regions experiencing whistler turbulence. Additionally, it has been shown that suprathermal electrons can be generated by various plasma instabilities in astrophysical media, including whistler, firehose, mirror, and cyclotron instabilities. In particular, current drive exhibited in localized areas, such as the upstream and downstream regions of collisionless shocks, could trigger plasma instabilities that significantly amplify the magnetic field and generate suprathermal particles through waves satisfying cyclotron resonance conditions [26–28, 40–43]. The characteristics of these plasma instabilities and their acceleration efficiency depend on the properties of collisionless shocks, including the shock Mach number, plasma magnetization, and the geometry of the background magnetic field [27, 40]. Moreover, Lower-Hybrid waves could be induced by diamagnetic currents in inhomogeneous plasma systems, which typically propagate in space and astrophysical plasmas, including those with compressible turbulence. The roles of particle acceleration or heating through Lower-Hybrid waves have also been proposed [44, 45]. In this context, it is necessary to conduct further investigations, including the theory of particle transport through various plasma instabilities triggered in astrophysical media, corresponding numerical simulations to support the theory, and complementary observations representing particle acceleration and heating.

REFERENCES

1. R. Dumont, *Encyclopedia of Nuclear Energy* **3**, 479 (2021).
2. A. A. Schekochihin, S. C. Cowley, and W. Dorland, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **49**, A195 (2007).
3. C. Vogt and T. A. Ensslin, *Astronomy and Astrophysics* **434**, 67 (2005).
4. A. H. Minter and S. R. Spangler, *Astrophys. J.* **458**, 194 (1996).
5. R. J. Leamon, C. W. Smith, N. F. Ness, W. H. Matthaeus, and H. K. Wong, *J. Geophys. Res.* **103**(A3), 4775 (1998).
6. S. Regnier, *Astronomy and Astrophysics* **581**, A9 (2015).
7. S. Ni, Y. Chen, C. Li, Z. Zhang, H. Ning, X. Kong, B. Wang, and M. Hosseinpour, *Astrophys. J. Lett.* **891**, L25 (2020).
8. B. Cerutti and G. Giacinti, *Astronomy and Astrophysics* **642**, A123 (2020).
9. C. F. Kennel and F. V. Coroniti, *Astrophys. J.* **283**, 694 (1984).
10. A. A. Schekochihin, S. C. Cowley, W. Dorland, G. W. Hammett, G. G. Howes, E. Quataert, and T. Tatsuno, *Astrophys. J. Supplement Series* **182**, 310 (2009).
11. G. G. Howes, *ArXiv:2402.12829* (2024).
12. L. Bercic, M. Maksimovic, J. S. Halekas et al., *Astrophys. J.* **921**, 83 (2021).
13. J. Halekas, P. Whittlesey, D. Larson et al., *Astrophys. J. Supplement Series* 246, 22 (2020).
14. S. Kim, P. H. Yoon, G. Choe, and L. Wang, *Astrophys. J.* **806**, 32 (2015).
15. P. H. Yoon, *J. Phys.: Conference Series* **642**, 012030 (2015).
16. B. Tang, L. Adhikari, G. P. Zank, and H. Che, *Astrophys. J.* **964**, 180 (2024).
17. B. Tang, G. P. Zank, and V. I. Kolobov, *Astrophys. J.* **924**, 113 (2022).
18. V. Pierrard, M. Lazar, and R. Schlickeiser, *Solar Physics* **269**, 421 (2011).
19. G. P. Zank, *Transport Processes in Space Physics and Astrophysics*, Springer, Berlin (2014).
20. O. Allanson, T. Elsden, C. Watt, and T. Neukirch, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* **8**, 805699 (2022).
21. S.-Y. Jeong, D. Verscharen, R. T. Wicks, and A. N. Fazakerley, *Astrophys. J.* **902**, 128 (2020).
22. J. Steinacker and J. A. Miller, *Astrophys. J.* **393**, 764 (1992).
23. C. Vocks, C. Salem, R. P. Lin, and G. Mann, *Astrophys. J.* **627**, 540 (2005).
24. A. Micera, Zhukov A. N., R. Lopez et al., *Astrophys. J. Lett.* **903**, L23 (2020).
25. A. Micera, Zhukov A. N., R. Lopez et al., *Astrophys. J.* **919**, 42 (2021).
26. D. Caprioli and A. Spitkovsky, *Astrophys. J.* **783**, 91 (2014).
27. J.-H. Ha, S. Kim, D. Ryu, and H. Kang, *Astrophys. J.* **915**, 18 (2021).
28. A. Bohdan, J. Niemiec, O. Kobzar, and M. Pohl, *Astrophys. J.* **847**, 71 (2017).
29. V. Bresci, M. Lemoine, L. Gremillet, L. Comisso, L. Sironi, and C. Demidem, *Phys. Rev. D* **106**, 023028 (2022).
30. L. Comisso and L. Sironi, *Astrophys. J. Lett.* **936**, L27 (2022).
31. C. Vega, S. Boldyrev, V. Roytershteyn, and M. Medvedev, *Astrophys. J. Lett.* **924**, L19 (2022).
32. P. Helander and D. J. Sigmar, *Collisional Transport in Magnetized Plasmas*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2005), Vol. 4.
33. P. H. Yoon, *Phys. Plasmas* **19**, 052301 (2012).
34. P. H. Yoon, *J. Geophys. Res.: Space Physics* **119**, 7074 (2014).
35. V. Pierrard, M. Lazar, and S. Stverak, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* **9**, 892236 (2022).
36. N. J. Fisch, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 175 (1987).

37. S. I. Popel and V. N. Tsytovich, *Contributions to Plasma Physics* **31**, 77 (1991).
38. O. Chang, S. P. Gary, and J. Wang, *Phys. Plasmas* **21**, 052305 (2014).
39. E. Camporeale and G. Zimbardo, *Phys. Plasmas* **22**, 092104 (2015).
40. S. Kim, J.-H. Ha, D. Ryu, and H. Kang, *Astrophys. J.* **913**, 35 (2021).
41. M. A. Riquelme and A. Spitkovsky, *Astrophys. J.* **733**, 63 (2012).
42. A. R. Bell, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **353**, 550 (2004).
43. E. Amato and P. Blasi, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **392**, 1591 (2009).
44. I. Shinohara and M. Hoshino, *Adv. Space Res.* **24**, 43 (1999).
45. F. Lavoretti, P. Henri, F. Califano, S. Aizawa, and N. Andre, *Astronomy and Astrophysics* **652**, A20 (2021).

РЕЗОНАНСНЫЕ ВОЛНОВОДНЫЕ ПОТЕРИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В СЛОЕ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА, ОГРАНИЧЕННОГО ИТО-ЭЛЕКТРОДАМИ

С. П. Палто, Д. О. Рыбаков, А. Р. Гейвандов, И. В. Касьянова*

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова,
Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт»
119333, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 августа 2024 г.,
после переработки 5 сентября 2024 г.
Принята к публикации 5 сентября 2024 г.

В планарно-ориентированном слое нематического жидкого кристалла (ЖК) с люминесцентным красителем исследованы спектры люминесценции, возникающей при лазерном возбуждении молекул красителя и распространяющейся в волноводном режиме. Показано, что наличие ИТО-электродов, ограничивающих слой ЖК, приводит к существенным резонансным потерям энергии излучения. Эти потери объясняются фазовым синхронизмом между волноводными модами в слое ЖК и ИТО-электродах. Спектральное положение максимумов потерь зависит от состояния поляризации света, а их интенсивность растет с уменьшением толщины слоя ЖК. Показано, что использование ориентирующих ЖК-слоев на основе фторированных полимеров с низким показателем преломления, нанесенных на ИТО-электроды, позволяет существенно подавить резонансные потери излучения.

DOI: 10.31857/S0044451025010122

1. ВВЕДЕНИЕ

Наряду с широким применением жидких кристаллов (ЖК) в информационных дисплейных технологиях, в последнее время огромный интерес вызывает использование ЖК в различных фотонных устройствах. В частности, допированные лазерными красителями ЖК могут быть использованы как для изучения фотонных свойств ЖК [1, 2], так и в качестве активной среды для микролазерных систем [3–7]. Особое место среди последних занимают микролазеры, работающие в волноводном режиме генерации света [8–12]. Однако, вместе с множеством преимуществ волноводного режима лазерной генерации, для этого режима характерны и недостатки. Например, для управления слоем ЖК, с целью создания пространственно-периодической модуляции показателя преломления и соответственно распределенной обратной связи, необходимы управляющие электроды, ограничивающие слой ЖК. В ЖК-устройствах широко применяются прозрачные

электроды на основе сплава окиси олова и индия (ИТО). В последнем случае с неизбежностью возникает проблема, связанная с минимизацией потерь световой энергии в электродах при распространении излучения в волноводном режиме.

В работе [13] методом численного FDTD-моделирования было показано, что распространение излучения в волноводном режиме в ориентированных слоях ЖК, ограниченных прозрачными ИТО-электродами, характеризуется сильными резонансными потерями. Эти потери возникают в определенных спектральных диапазонах волн из-за фазосинхронной перекачки энергии излучения из жидкокристаллического слоя в тонкие электродные слои. В настоящей работе предпринята попытка экспериментального наблюдения предсказанных в [13] резонансных потерь, методом возбуждения люминесценции в слое ЖК и регистрации спектра этой люминесценции на выходе жидкокристаллического волновода, образованного самим ЖК-слоем и ограничивающими его слоями, включая ИТО. Также изучается возможность уменьшения потерь введением между ИТО-электродами и слоем ЖК ориентирующих слоев с низким показателем преломления, как это было рекомендовано в [13].

* E-mail: sergei.palto@gmail.com

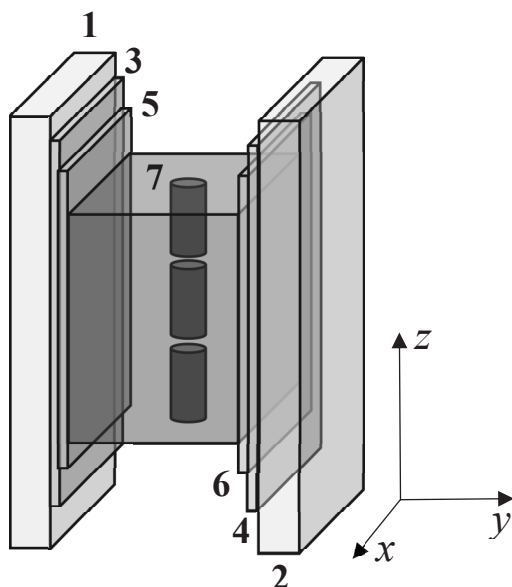


Рис. 1. Схематическое изображение слоистой структуры ЖК-ячейки. 1, 2 — стеклянные подложки; 3, 4 — слои ИТО-электродов; 5, 6 — полимерные ориентирующие слои, натертые в направлении z ; 7 — слой ЖК (Е7) с красителем DCM (оси цилиндров указывают направление директора ЖК)

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОБРАЗЦЫ

Схема экспериментальной ЖК-ячейки с ИТО-электродами показана на рис. 1. Ячейка состоит из двух стеклянных подложек 1, 2, на внутренние стороны которых нанесены прозрачные ИТО-электроды 3, 4. Нами использованы промышленные стекла для дисплейных технологий с измеренной нами толщиной ИТО-электродов 150 ± 10 нм. Для планарной ориентации нематического ЖК (Е7, Merck) на поверхность ИТО наносились тонкие полимерные пленки 5, 6, которые механически натирались мягкой тканью вдоль оси z , определяющей направление легкой оси и соответственно направление оптической оси в слое ЖК. Для тонких ориентирующих пленок мы использовали два типа полимеров: а) полиимид (PI) с показателем преломления 1.65 (лак АД9103, НПО Пластик); б) фторированный полимер с показателем преломления 1.42 (сополимер тетрафторэтилена и винилиденфторида Ф42-В). Толщина жидкокристаллического слоя, тип ориентирующей пленки и наличие ИТО-электродов варьировались в зависимости от номера образца (см. таблицу).

Как видно из таблицы, образец №1 не содержит ИТО-электродов. Эта ЖК-ячейка использова-

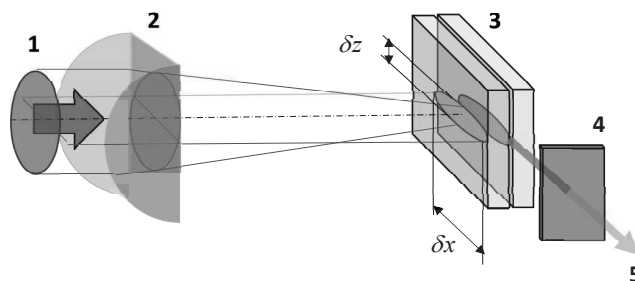


Рис. 2. Схема возбуждения люминесценции в слое ЖК, 1 — лазерный пучок ($\lambda = 532.8$ нм, $\tau = 10$ нс); 2 — цилиндрическая линза (фокусное расстояние 100 мм, характерные размеры области фокусировки $\delta z = 0.1$ мм; $\delta x = 3$ мм); 3 — жидкокристаллическая ячейка; 4 — набор оптических фильтров и поляризатор; 5 — излучение, регистрируемое оптоволоконным спектрометром

лась нами в качестве референсного образца для визуализации в оптических спектрах излучения изменений, связанных с наличием ИТО-электродов.

Выбор жидкого кристалла Е7 обусловлен высокой степенью изученности данного материала и известностью многочисленных физических параметров. Например, спектральные зависимости показателя преломления, которые очень важны для наших исследований, известны в широком спектральном диапазоне [14], что позволило нам построить реалистичную модель резонансных потерь в слое Е7 между ИТО-электродами в работе [13]. Для придания слою ЖК люминесцирующих свойств использовался известный лазерный краситель DCM (4-(Dicyanomethylene)-2-methyl-6-(4-dimethylaminostyryl)-4H-pyran, Sigma Aldrich, 0.6 вес.%). Данный краситель характеризуется интенсивной люминесценцией в диапазоне длин волн 570–650 нм и широко используется для получения лазерного эффекта в том числе и в различных ЖК-системах.

Схема возбуждения и регистрации люминесценции показана на рис. 2. Возбуждение люминесценции в слое ЖК осуществлялось с использованием излучения 1 от неодимового лазера, работающего в режиме модулированной добротности на длине волны $\lambda = 532.8$ нм при длительности импульса 10 нс. Энергия импульса составляла примерно 80 мкДж. Лазерное излучение было линейно поляризованным в направлении z (вдоль директора ЖК), что обеспечивает максимальную эффективность люминесценции [11]. Лазерный пучок фокусировался на слой ЖК в ячейке 3 цилиндрической линзой 2 в уз-

Таблица. Исследованные образцы и их параметры

№ образца	Толщина слоя ЖК, мкм	Тип образца	Толщина ориентирующей пленки, нм	Наличие ИТО
1	6.7 ± 0.2	PI	20 ± 10	Нет
2	6.8 ± 0.2	PI	20 ± 10	Да
3	2.4 ± 0.2	PI	20 ± 10	Да
4	12 ± 0.2	PI	20 ± 10	Да
5	6.3 ± 0.2	Φ42-B	350 ± 20	Да

кую полосу шириной $\delta z = 0.1$ мм и протяженностью $\delta x = 3$ мм в направлении x волноводного распространения люминесценции 5. Положение x_0 центра сфокусированной области, измеряемое от торца ЖК-ячейки, варьировалось от 1.5 до 2.5 мм.

Люминесценция с торца ЖК-слоя регистрировалась оптоволоконным спектрометром Avantes Avaspec 2048. Для исключения регистрации излучения, вытекающего в подложки, торцы последних покрывались слоем светонепроницаемого (черного) красителя и использовалась маска со щелью. Для регистрации поляризационных спектров перед линзой оптоволоконного кабеля спектрометра устанавливался поляризатор 4, что позволяло регистрировать спектры ТЕ- (направление колебаний электрического вектора вдоль оси z и директора ЖК (рис. 1) и ТМ-поляризованного излучения (направление колебаний электрического вектора в плоскости xy). Кроме того, для ослабления как рассеянного лазерного излучения, так и люминесценции, в случае необходимости использовались стеклянные оптические фильтры, которые, как и поляризатор, устанавливались перед входной линзой оптоволоконного кабеля спектрометра.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 3 показаны спектры неполяризованной люминесценции для референсного образца № 1 (см. таблицу) без ИТО-электродов (кривая 1) и образца № 2 (кривая 2), полученные при одинаковых энергиях (около 80 мкДж) импульса лазерного возбуждения. Обращаем внимание, что здесь и ниже интенсивность люминесценции показана в логарифмическом масштабе. Как видно, интенсивность люминесценции в случае образца № 2 с ИТО-электродами существенно ниже интенсивности люминесценции, зарегистрированной для референсно-

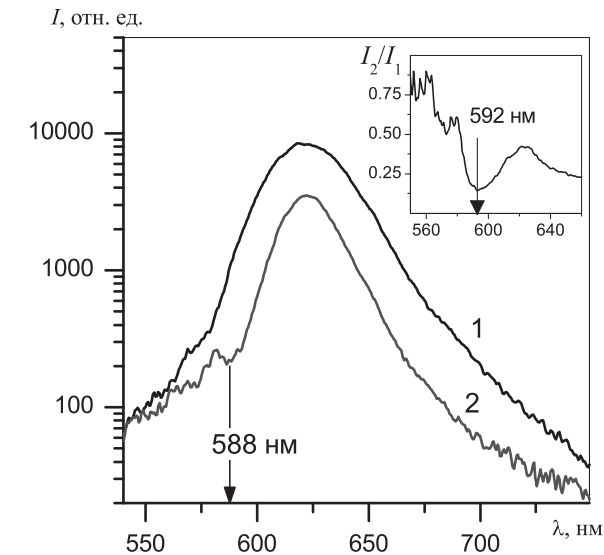


Рис. 3. Спектры люминесценции на выходе торца ЖК-ячейки (см. рис. 2) после распространения излучения в слое ЖК в волноводном режиме. Протяженность области накачки, определяющей длину, на которой распространяется излучение, $\delta x = 3$ мм, расстояние от центра накачки до края ЖК-ячейки $x_0 = 1.5$ мм. Кривая 1 — спектр образца № 1 (ИТО-электроды отсутствуют); кривая 2 — спектр образца № 2 (имеются ИТО-электроды толщиной 150 нм). На вставке показано отношение спектра образца № 2 к спектру образца № 1

го образца № 1. В спектре (кривая 2) можно также видеть характерный провал на длине волны 588 нм, который отсутствует в образце без ИТО. Если взять отношение спектра 2 к спектру 1, то получим спектральную зависимость относительных потерь I_2/I_1 в образце № 2 по отношению к образцу № 1 (вставка на рис. 3).

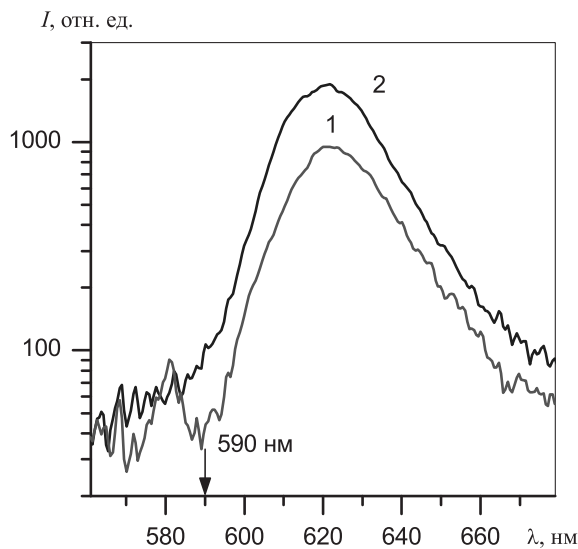


Рис. 4. Поляризационные спектры люминесценции, измеренные для образца № 1, где 1 — ТЕ-поляризация; 2 — ТМ-поляризация. Расстояние от центра накачки до края ЖК-ячейки $x_0 = 1.5$ мм

Видно, что относительные потери, связанные с наличием ИТО-электродов, характеризуются спектральной полосой с максимумом поглощения на длине волны 592 нм. Интенсивность люминесценции на данной длине волны для образца № 2 примерно в 8 раз меньше, чем для образца № 1. Наблюдается также рост потерь на длинах волн более 625 нм. К сожалению, эту более длинноволновую полосу трудно зарегистрировать во всем диапазоне с хорошей точностью из-за очень низкой интенсивности люминесценции на длинах волн более 650 нм.

Согласно численным расчетам в работе [13] для планарно-ориентированного жидкокристаллического слоя E7, ограниченного ИТО-электродами толщиной 170 нм, в спектральном диапазоне 550–900 нм существует две резонансные полосы с максимальными потерями на длинах волн $\lambda_1 = 570$ нм и $\lambda_2 = 705$ нм соответственно для ТЕ- и ТМ-поляризованного света. Спектральное положение этих потерь не зависит от толщины слоя ЖК. Однако, согласно [13], изменение толщины слоя ИТО, а также наличие полиимидной пленки могут сдвигать спектральное положение резонансных полос. Принимая во внимание экспериментальную ошибку, связанную с измерением толщины слоя ИТО, а также наличие в экспериментальном образце № 2 тонкой ориентирующей полиимидной пленки, мы

отождествляем наблюдаемый максимум потерь на длине 592 нм с рассчитанной в [13] резонансной полосой на длине волны $\lambda_1 = 570$ нм для ТЕ-поляризованной моды. Аналогично, увеличивающиеся потери с увеличением длины волны более 625 нм (вставка на рис. 3) объясняются рассчитанной резонансной полосой на длине волны $\lambda_2 = 705$ нм для ТМ-поляризованного света. Спектральные данные на рис. 4, где показаны поляризационные спектры люминесценции, подтверждают сделанный вывод. Провал в интенсивности люминесценции на длине волны 588 нм характерен лишь для ТЕ-поляризованной моды (кривая 1 на рис. 4). С ростом длины волны выше 625 нм интенсивность ТМ-поляризованной люминесценции, показанная кривой 2, убывает быстрее, чем интенсивность ТЕ-моды (кривая 1). Таким образом, наблюдаемые длинноволновые потери также согласуются с численной моделью в [13].

Согласно аналитической модели тонкого ИТО-слоя с показателем преломления n_1 между стеклянной подложкой (показатель преломления n_0) и жидкокристаллическим слоем n_2 , длины волн для максимумов резонансных потерь определяются следующими соотношениями [13]:

$$\lambda_{m,TE,TM} = \frac{2d_{ITO}n_2}{m - \frac{\delta\phi_{TE,TM}}{2\pi}} \times \sqrt{\left(\frac{n_1}{n_{2,TE,TM}}\right)^2 - 1}, \quad (1)$$

где индексы ТЕ, ТМ относятся к ТЕ- и ТМ-поляризованному свету соответственно; m — натуральное число. Для поляризованного света дополнительные набег фаз $\delta\phi$ в (1), связанные с двойным отражением волн в ИТО-слое от границы контакта ИТО со стеклянной подложкой и ЖК-слоем, определяются для ТЕ- и ТМ-поляризованного света следующими соотношениями:

$$\delta\phi_{TE} = -2 \left[\arctg \left(\frac{\sqrt{\sin^2(\theta_{1,TE}) - \left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2}}{\cos(\theta_{1,TE})} \right) + \arctg \left(\frac{\sqrt{\sin^2(\theta_{1,TE}) - \left(\frac{n_{2,TE}}{n_1}\right)^2}}{\cos(\theta_{1,TE})} \right) \right],$$

$$\delta\phi_{TM} = 2\pi - 2 \left[\arctg \left(\frac{\sqrt{\sin^2(\theta_{1, TM}) - \left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2}}{\left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2 \cos(\theta_{1, TM})} \right) + \right. \\ \left. + \arctg \left(\frac{\sqrt{\sin^2(\theta_{1, TM}) - \left(\frac{n_{2, TM}}{n_1}\right)^2}}{\left(\frac{n_{2, TM}}{n_1}\right)^2 \cos(\theta_{1, TM})} \right) \right].$$

Здесь также важно учитывать спектральную дисперсию показателей преломления: $n_0 \equiv n_0(\lambda)$ — показатель преломления стеклянной подложки, $n_1 \equiv n_1(\lambda)$ — показатель преломления ИТО, $n_{2, TE, TM} \equiv n_{2, TE, TM}(\lambda)$ — зависящий от состояния поляризации показатель преломления ЖК (для планарно ориентированного ЖК $n_{2, TE} = n_{\parallel}$, $n_{2, TM} = n_{\perp}$), θ_1 — угол между нормалью к слоям и волновым вектором волны в ИТО-слое (если речь идет о перекачке планарно распространяющейся моды из ЖК-слоя в ИТО, то $\sin \theta_1 = n_1/n_{2, TE, TM}$).

Как следует из (1), реальные решения существуют лишь при условии $n_1 \geq n_2$. Для ИТО имеет место сильная спектральная дисперсия показателя преломления [13], поэтому соответствующие решения существуют лишь в определенных спектральных диапазонах, которые различаются для ТЕ- и ТМ-поляризованного света из-за оптической анизотропии ЖК и, соответственно, требований

$$n_1 \geq n_{2, TE}, \quad n_1 \geq n_{2, TM}.$$

Как показано в [13], в случае планарной ориентации ЖК, для ТМ-поляризованного света существуют лишь два решения: $\lambda_m \cong 720$ нм для $m = 1$ и $\lambda_m \cong 440$ нм для $m = 2$. Поскольку спектр люминесценции ограничен диапазоном примерно 550–700 нм, мы можем наблюдать лишь коротковолновый край поглощения для ТМ-моды с $m = 1$, который, как мы полагаем, хорошо виден на длинах волн более 625 нм (вставка на рис. 3). Для ТЕ-поляризации соответствующий пик потерь оказывается на длине волны 570 нм, который, с учетом погрешностей и некоторых различий между нашим экспериментом и моделью, очень близок к наблюдаемому на длине волны 592 нм (см. вставку на рис. 3). В эксперименте, как и в модели, этот пик потерь наблюдается исключительно для ТЕ-поляризованного света (рис. 4).

Модель в [13] предсказывает сильный рост потерь с уменьшением толщины ЖК-слоя. Это подтвердилось и в эксперименте (рис. 5). В данном случае кривая 1 получена для образца №3 (см. таблицу), где толщина ЖК-слоя $d = 2.4$ мкм, а кривая 2 — для толщины $d = 12$ мкм. Обе кривые получены для неполяризованного света, поэтому можно видеть как потери с максимумом на длине волны

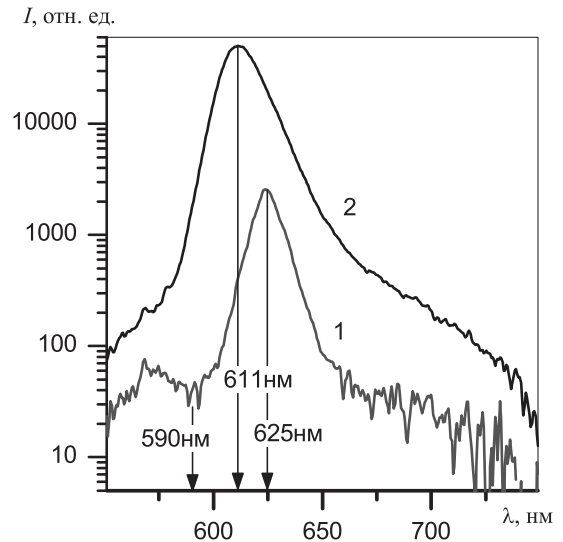


Рис. 5. Спектры неполяризованной люминесценции для образца №3 (кривая 1, $d = 2.4$ мкм) и для образца №4 (кривая 2, $d = 12$ мкм). Расстояние от центра накачки до края ЖК-ячейки $x_0 = 2.5$ мм

592 нм, так и начало резкого уменьшения люминесценции на длинах волн выше 625 нм, что связывается нами с существованием более длинноволновой полосы потерь с максимумом на длине волны более 700 нм. Из сравнения интенсивностей люминесценции на длине волны 590 нм легко видеть, что при уменьшении толщины от 12 до 2.4 мкм потери увеличились примерно в 40 раз. Наличие интенсивных полос потерь для образца №3 в окрестности $\lambda_m \cong 590$ нм и в более длинноволновой области ($\lambda_m > 700$ нм) приводит к тому, что спектральная область люминесценции сильно сужается (кривая 1, рис. 5), а максимум люминесценции смещается в длинноволновую область спектра к $\lambda = 625$ нм, где потери минимальны. В образце №4 (кривая 2) полосы потерь выражены лишь в виде плеч в спектре люминесценции, а спектрального сдвига максимума люминесценции практически не наблюдается ($\lambda = 611$ нм). Отметим, что при фиксированной накачке примерно 80 мкДж в образце №4 интенсивность люминесценции в максимуме оказалась настолько высокой, что нам пришлось сдвинуть центр накачки от края ЖК-ячейки до значения $x_0 = 2.5$ мм, чтобы оставаться в пределах динамического диапазона спектрометра.

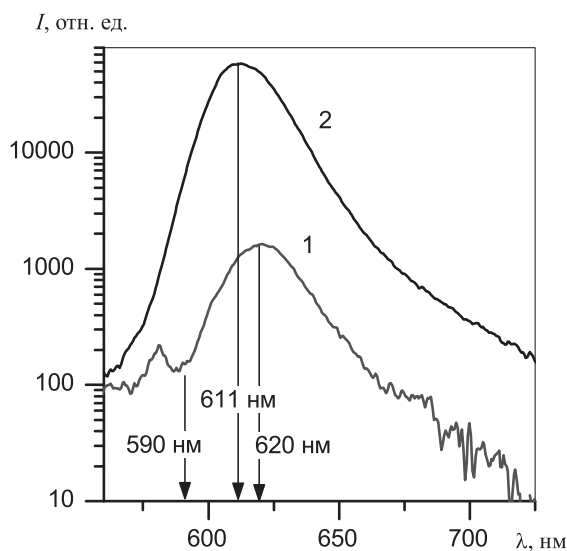


Рис. 6. Спектры неполяризованной люминесценции для образца № 2 (кривая 1, $d = 6.8$ мкм) и для образца № 5 (кривая 2, $d = 6.3$ мкм). Расстояние от центра накачки до края ЖК-ячейки $x_0 = 1.5$ мм

Таким образом, спектральные измерения полностью подтвердили наличие резонансных потерь, обусловленных ИТО-электродами. Согласно уже упомянутому численному моделированию, резонансные потери могут быть существенно подавлены введением между слоем ЖК и ИТО-электродами тонких пленок с низким показателем преломления. Именно этому условию удовлетворяет образец № 5, где в качестве ориентирующих ЖК-пленок используются сравнительно толстые (350 нм) пленки из фторированного полимера Ф42-В с показателем преломления 1.42. Результаты измерения спектров люминесценции оказались весьма впечатляющими (рис. 6). При фиксированной энергии импульса накачки 80 мкДж интенсивность люминесценции в максимуме выросла примерно в 50 раз по сравнению с образцом № 2. Также исчезли характерная полоса с максимумом потерь на 590 нм и потери в длинноволновой части спектра, характерные для образца № 2. На длинах волн более 650 нм люминесценция существенно выросла так, что даже на 750 нм измеряемый сигнал люминесценции существенно превышает уровень шума.

Отметим, что интенсивность люминесценции в образце № 5 существенно превышает не только та-

ковую в образце № 2, но и в образце № 1, где ИТО-электроды отсутствуют. Таким образом, высокая интенсивность люминесценции в образце № 5 связана не только с устранением резонансных потерь. Мы предполагаем, что в случае образца № 5 существенным фактором, способствующим увеличению интенсивности люминесценции, является и то, что показатель преломления фторополимера ($n = 1.42$) существенно ниже показателя преломления стеклянных подложек ($n_0 = 1.51$). Благодаря этому в ЖК-слое образца № 5 может распространяться существенно большее количество волноводных ТМ- и ТЕ-поляризованных мод излучения, чем в образцах № 1, 2. Действительно, в случае образцов № 1, 2 наименьший показатель преломления ЖК $n_{\perp} = 1.52$, с которым взаимодействуют ТМ-поляризованные моды, оказывается очень близким к показателю преломления дисплейного стекла (1.51). Поэтому критический угол по отношению к плоскости подложек, ниже которого существуют волноводные моды, очень мал и значительное количество ТМ-поляризованного излучения люминесценции, распространяющегося под углом выше критического, вытекает в стеклянные подложки. Ситуация усугубляется и тем, что в реальности директор ЖК не строго совпадает с направлением ТЕ-поляризации из-за наличия небольшого ($2-4^\circ$) угла преднаклона директора по отношению к плоскости подложек. Таким образом, даже ТЕ-поляризованное излучение, для которого условие волноводного режима выполнено для широкого диапазона углов распространения, частично преобразуется по мере распространения в ТМ-поляризованные моды, вытекающие в подложку. Резонансные потери, в свою очередь, характеризуются достаточно широкими спектрами, что приводит к значительному уменьшению интенсивности люминесценции даже на длинах волн вдали от резонансных максимумов. Это не только видно на вставке к рис. 3, но, например, особенно ярко выражено на рис. 5 для образца № 3 (кривая 1), где, как уже отмечалось, из-за существенных потерь на «хвостах» резонансных полос наблюдается сужение спектра и сдвиг максимума люминесценции. Таким образом, резонансные потери приводят к уменьшению люминесценции во всем спектральном диапазоне. Отметим также, что моделирование в [13], где резонансные полосы являются сравнительно узкими, было выполнено для одномодового режима, когда «инжектированный» в волновод свет характеризовался волновым вектором, строго параллельным плоскости ЖК-слоя.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально подтверждено наличие резонансных потерь при распространении излучения в волноводном режиме в жидкокристаллическом слое, ограниченном ИТО-электродами. Наблюдаемые спектральные полосы потерь являются поляризационно-чувствительными. Спектральное положение этих полос не зависит от толщины слоя ЖК, а их интенсивность увеличивается по мере уменьшения толщины слоя. Также продемонстрировано, что использование ориентирующих пленок из фторированного полимера, обладающего низким показателем преломления, позволяет подавить резонансные потери. Полученные результаты являются важными для использования волноводного режима в управляемых электрическим полем жидкокристаллических устройствах, использующих волноводный режим распространения света, и, в частности, жидкокристаллических микролазерах.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ЛИТЕРАТУРА

1. П. В. Долганов, В. К. Долганов, Письма в ЖЭТФ **108**, 170 (2018).
2. П. В. Долганов, Письма в ЖЭТФ **105**, 616 (2017).
3. И. П. Ильчишин, Е. А. Тихонов, В. Г. Тищенко и др., Письма в ЖЭТФ **32**, 27 (1980) [I. Il'chishin, E. Tikhonov, V. Tishchenko et al., JETP Lett. **32**, 24 (1980)].
4. W. Cao, A. Munos, P. Palffy-Muhoray et al., Nature Mater. **1**, 111 (2002).
5. A. Chanishvili, G. Chilaya, G. Petriashvili et al., Appl. Phys. Lett. **86**, 051107 (2005).
6. J. Ortega, C. L. Folcia, and J. Etxebarria, Materials **11**, 5 (2018).
7. S. P. Palto, N. M. Shtykov, B. A. Umanskii et al., J. Appl. Phys. **112**, 013105 (2012).
8. T. Matsui, M. Ozaki, and K. Yoshino, in *Proc. SPIE 5518, Liquid Crystals VIII* (2004).
9. Y. Inoue, H. Yoshida, K. Inoue et al., Appl. Phys. Express **3**, 102702 (2010).
10. H. Yunxi, Z. Xiaojuan, Y. Benli et al., Nanophotonics **10**, 3541 (2021).
11. Н. М. Штыков, С. П. Палто, Б. А. Уманский и др., Кристаллография **64**, 275 (2019).
12. N. M. Shtykov, S. P. Palto, A. R. Geivandov et al., Opt. Lett. **45**, 4328 (2020).
13. S. P. Palto and A. R. Geivandov, Photonics **10**, 1089 (2023).
14. J. Li, C.-H. Wen, S. Gauza et al., J. of Display Technol. **1**, 52 (2005).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи на русском и на английском языках.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ras.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru

Телефон: +7 (499) 137 56 22

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Заключение» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ras.ru);

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате L^AT_EX или Word, рисунки — в формате EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом.

5. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).
7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № P-16-22 (1987).
8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.

6. Все рисунки должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте.

7. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.pdf-файла. Список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.

8. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер контактного телефона.

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора)

Редакционный совет:

член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова

Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова