



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru

2023 г. Том 118 вып. 1, стр. 1 – 70

2023 г. Том 118 вып. 2, стр. 71 – 144



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 118

Выпуск 1

10 июля 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2023

© Редакция журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2023

Jet quenching in mini-quark-gluon plasma: Medium modification factor I_{pA} for photon-tagged jets

B. G. Zakharov¹⁾

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, 117334 Moscow, Russia

Submitted 28 May 2023
Resubmitted 28 May 2023
Accepted 30 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823130013, EDN: fyqrpg

Heavy ion collision experiments at RHIC and the LHC led to the discovery of the Quark Gluon Plasma (QGP) formation in AA collisions. The most striking manifestations of the QGP formation in AA collisions are the strong suppression of high- p_T hadron spectra (jet quenching) and the transverse flow effects in the azimuthal correlations for soft hadrons. Jet quenching in AA collisions is due to radiative and collisional energy loss of fast partons in the hot QGP. The dominant contribution to the parton energy loss comes from the radiative mechanism due to induced gluon radiation [1, 2]. Hydrodynamic analyses of soft hadron production in AA collisions show that the QCD matter produced in AA collisions flows almost as a perfect fluid (for reviews, see, e.g., [3, 4]). In recent years, the azimuthal correlations in soft hadron production (the ridge effect), similar to that observed in AA collisions, have been observed in pp/pA collisions. The formation of a mini QGP (mQGP) fireball is the most popular explanation of the ridge/flow effects in pp/pA collisions (for a review, see [5]). There are several experimental evidences supporting the onset of the mQGP regime in pp/pA collisions at the charged hadron multiplicity density $dN_{ch}/d\eta \gtrsim 5$ [6, 7]. It is important that, from the point of view of the multiplicity density, conditions for the mQGP formation in pp/pA collisions are more favorable for events with jet production. Because in jet events the average multiplicity density of soft (underlying-event (UE)) hadrons is larger than the minimum-bias multiplicity by a factor of $\sim 2-2.5$ [8]. At the LHC energies in pp jet events we have $dN_{ch}^{ue}/d\eta \sim 10-15$ (and by a factor of $\sim 2-3$ larger values for pA collisions), that seems to be large enough to expect the mQGP formation (in the light of the results of [6, 7]). In the scenario with the mQGP formation in pp/pA collisions, the jet quenching effects must appear. Similarly to AA collisions, they should modify the jet fragmentation functions (FFs) and hadron spectra

in pp/pA collisions as compared to predictions of the standard pQCD. The recent ALICE [9] measurement of the jet FF modification factor I_{pp} for the hadron-tagged jets in pp collisions at $\sqrt{s} = 5.02$ TeV seems to confirm the scenario with the mQGP formation and jet quenching in pp collisions, since the data [9] show a monotonic decrease of I_{pp} with the UE multiplicity expected for the scenario with the mQGP formation [10]. The results of [9] agree within errors with calculations of [11] in the framework of the light-cone path integral (LCPI) approach to induced gluon emission [2].

One of the promising ways to probe the jet quenching effects in pA collisions is measurement of the medium modification factor I_{pA} for the photon-tagged FFs for $\gamma + \text{jet}$ events. In analogy with the medium modification factor I_{AA} in AA collisions (see, e.g., [12, 13]), I_{pA} , for a given photon transverse momentum p_T^γ , is defined as the ratio

$$I_{pA}(z_T, p_T^\gamma) = D_h^{pA}(z_T, p_T^\gamma) / D_h^{pp}(z_T, p_T^\gamma), \quad (1)$$

where $D_h^{pA,pp}$ are the photon-tagged FFs of the away-side hard partons to the associate charged hadron h for pA and pp collisions, $z_T = p_T^h / p_T^\gamma$, and p_T^h is the hadron transverse momentum. Experimentally, the photon-tagged FF D_h is the away-side associated hadron yield per trigger photon. In terms of the inclusive cross sections, D_h reads

$$D_h(z_T, p_T^\gamma) = \frac{p_T^\gamma d^3\sigma}{dp_T^h dp_T^\gamma dy^\gamma} \left(\frac{d^2\sigma}{dp_T^\gamma dy^\gamma} \right)^{-1}. \quad (2)$$

The advantage of I_{pA} is that experimental D_h do not suffer from the uncertainties of the yield normalizations in pA/pp collisions (since both the numerator and the denominator in (2) are hard cross sections, and the normalization uncertainties are largely canceled in D_h). For the same reason, the theoretical I_{pA} , contrary to the nuclear modification factor R_{pA} for pA hadron spectra, is insensitive to uncertainties in the nuclear and proton PDFs.

¹⁾e-mail: bgz@itp.ac.ru

Recently, the midrapidity I_{pA} has been measured by the ALICE collaboration [14] for 5.02 TeV $p + \text{Pb}$ collisions for the trigger photon momentum $12 < p_T^\gamma < 40$ GeV. The ALICE measurement gives $\langle I_{pA} \rangle \approx 0.84 \pm 0.11(\text{stat}) \pm 0.19(\text{sys})$. The z_T -dependence of I_{pA} obtained in [14] has some tendency of I_{pA} towards decrease with increasing z_T . This pattern, at least roughly, is what is expected in the scenario with the mQGP formation. Of course, to understand better whether the results of [14] are consistent with the scenario with the mQGP formation in pp/pA collisions, quantitative calculations of I_{pA} for this scenario are necessary. In this paper, we perform calculations of I_{pA} for conditions of the ALICE experiment [14]. We use the LCPI approach [2] to induced gluon emission with temperature dependent α_s [15], which has successfully been used in our recent analysis [16] of the available data on the nuclear modification factor R_{AA} .

We have calculated the medium modification factor I_{pA} for the photon-tagged jets in 5.02 TeV $p + \text{Pb}$ collisions for the conditions of the ALICE experiment [14] in the scenario with the mQGP formation. Radiative and collisional energy losses of fast partons in the QGP have been evaluated with running $\alpha_s(Q, T)$ that has a plateau around $Q \sim \kappa T$. We perform calculations using $\kappa = 2.55$ fitted to the LHC heavy ion data on the nuclear modification factor R_{AA} . To understand the relative contribution to $dN_{ch}^{ue}(pA)/d\eta$ in pA jet events of hadrons that are not related to the mQGP fireball, we have performed simulation of the entropy deposition for pA jet events within the Monte Carlo wounded nucleon Glauber model in the form suggested in [17], which was successfully used in [18, 19] for description of a large amount of experimental data on AA and pA collisions from RHIC and the LHC. Our calculations show that jet quenching can lead to a deviation of I_{pA} from unity by $\sim 0.1-0.2$ for $z_T \sim 0.5-0.8$ for the scenario with the mQGP formation both in $p + \text{Pb}$ and pp collisions. This, within errors, is consistent with the data from ALICE [14]. However, a definite conclusion about the presence or absence of jet quenching in pA collisions cannot be drawn due to large experimental errors of the ALICE data [14]. Our results demonstrate that this requires a significantly more accurate measurement of I_{pA} (with errors $\lesssim 0.1-0.2$).

This work is supported by Russian Science Foundation grant # 20-12-00200 in association with Steklov Mathematical Institute.

This is an excerpt of the article “Jet quenching in mini-quark-gluon plasma: medium modification factor I_{pA} for photon-tagged jets”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601719

1. R. Baier, Y. L. Dokshitzer, A. H. Mueller, S. Peigné, and D. Schiff, Nucl. Phys. B **483**, 291 (1997); arXiv:hep-ph/9607355.
2. B. G. Zakharov, JETP Lett. **63**, 952 (1996); arXiv:hep-ph/9607440.
3. R. Derradi de Souza, T. Koide, and T. Kodama, Prog. Part. Nucl. Phys. **86**, 35 (2016); arXiv:1506.03863.
4. P. Romatschke and U. Romatschke, *Relativistic Fluid Dynamics In and Out of Equilibrium*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom (2019); arXiv:1712.05815.
5. B. Schenke, Rept. Prog. Phys. **84**, 082301 (2021); arXiv:2102.11189.
6. J. Adam et al. (ALICE Collaboration), Nature Phys. **13**, 535 (2017); arXiv:1606.07424.
7. R. Campanini and G. Ferri, Phys. Lett. B **703**, 237 (2011).
8. R. Field, Acta Phys. Polon. B **42**, 2631 (2011); arXiv:1110.5530.
9. S. Tripathy (for ALICE Collaboration), in *24th DAE-BRNS High Energy Physics Symposium, 14-18 December 2020*, Jatni, India; arXiv:2103.07218.
10. B. G. Zakharov, Phys. Rev. Lett. **112**, 032301 (2014); arXiv:1307.3674.
11. B. G. Zakharov, JETP Lett. **116**, 347 (2022); arXiv:2208.10339.
12. X.-N. Wang, Z. Huang, and I. Sarcevic, Phys. Rev. Lett. **77**, 231 (1996); hep-ph/9605213.
13. L. Adamczyk et al. (STAR Collaboration), Phys. Lett. B **760**, 689 (2016); arXiv:1604.01117.
14. S. Acharya et al. (ALICE Collaboration), Phys. Rev. C **102**, 044908 (2020); arXiv:2005.14637.
15. B. G. Zakharov, JETP Lett. **112**, 681 (2020); arXiv:2011.01526.
16. B. G. Zakharov, JHEP **09**, 087 (2021); arXiv:2105.09350.
17. B. G. Zakharov, JETP Lett. **104**, 6 (2016); arXiv:1605.06012.
18. B. G. Zakharov, JETP **124**, 860 (2017); arXiv:1611.05825.
19. B. G. Zakharov, Eur. Phys. J. C **78**, 427 (2018); arXiv:1804.05405.

On the global temperature of the Schwarzschild–de Sitter spacetime

G. E. Volovik¹⁾

Low Temperature Laboratory, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland

Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 19 April 2023

Resubmitted 23 May 2023

Accepted 2 June 2023

DOI: 10.31857/S1234567823130025, EDN: fzbndt

The issue of the stability of the de Sitter (dS) vacuum is still an unsolved problem, see, e.g., [1, 2] and references therein. It is not excluded that even if the particle creation by Gibbons–Hawking (GH) radiation takes place, the dS expansion may immediately dilute the produced particles preventing the vacuum decay. One may think that study of the black hole in the dS environment – the Schwarzschild–de Sitter (SdS) spacetime with the presence of two horizons simultaneously – can be even more difficult task. Each horizon is characterized by its own temperature, see, e.g., [3–6]. It is not clear, whether such configuration allows a kind of global temperature [7].

Here we discuss the global temperatures T_{dS} and T_{SdS} , which characterize the thermal activation processes in the dS and SdS environments. These processes are not directly related to the horizons and to the corresponding Hawking radiation. The global temperatures T_{dS} and T_{SdS} are obtained when one considers for example the process of ionization of atoms in the dS and SdS spacetimes. We find that in spite of existence of two horizons, the temperature T_{SdS} does not depend on the mass of the black hole. It is solely determined by the Hubble parameter H , but is by factor $2\sqrt{3}$ larger than the GH temperature $T_{\text{GH}} = H/2\pi$ of Hawking radiation from the cosmological horizon in the dS spacetime.

We use the extension of Painlevé–Gullstrand (PG) coordinates, which describes the SdS metric in the whole range of radial coordinates [8]. In this coordinate system there is the point r_0 at which the shift function changes sign. At this point the observer is at rest, observers at $r < r_0$ are free falling to the black hole and observers at $r > r_0$ are free falling towards the cosmological horizon, see also [9]. The temperatures T_b and T_c of Hawking radiation and the activation temperature T_{SdS} are measured by the stationary observer.

The modified PG coordinates for SdS spacetime are:

$$ds^2 = -N^2 dt^2 + \frac{1}{N^2} (dr - v dt)^2 + r^2 d\Omega^2, \quad (1)$$

where the lapse function N and shift function v in the Arnowitt–Deser–Misner formalism are:

$$N^2 = 1 - C, \quad v(r) = \sqrt{C(1 - C)} \sqrt{\frac{r + 2r_0}{3rr_0^2}} (r - r_0), \quad (2)$$

where C and the stationary point r_0 are:

$$C = 3(GMH)^{2/3}, \quad r_0^3 = \frac{GM}{H^2}, \quad (3)$$

and M is the mass of black hole.

For the static observer at $r = r_0$ the measured frequency is red-shifted by the factor $N = (1 - C)^{1/2}$. As a result, the Hawking temperatures of black hole and cosmological horizons are renormalized [3], $T_b = T_{b0}/N$ and $T_c = T_{c0}/N$, where T_{b0} and T_{c0} are determined by gravity at horizons. The global temperature of Hawking radiation exists only in the limit $C \rightarrow 1$, when the black hole horizon approaches the cosmological horizon. Two temperatures approach the Bousso–Hawking value [3]:

$$T_{\text{BH}} = T_b = T_c = \sqrt{3} \frac{H}{2\pi} = \frac{1}{6\pi GM}. \quad (4)$$

In our approach, the global temperature T_{SdS} is not the temperature of the Hawking radiation. The T_{SdS} describes the processes of thermal activation measured by the stationary observer at $r = r_0$. We consider these processes on example of the ionization of an atom, which is not possible in Minkowski vacuum, but is possible in SdS. We follow the semiclassical tunneling approach [10–12] applied in [13] to the ionization in the dS background. For small C , when $T_c \ll T_b$, the imaginary momentum on the tunneling trajectory of electron is:

$$\text{Im } p_r(r) = \sqrt{2m\epsilon_0 - m^2 v^2(r)}, \quad (5)$$

¹⁾e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

where m is electron mass and ϵ_0 is the ionization energy. Near the stationary point $v(r) \approx \sqrt{3}H(r - r_0)$, and the probability of ionization is:

$$w \propto \exp\left(-2\text{Im} \int dr p_r(r)\right) = \exp\left(-\frac{\pi\epsilon_0}{\sqrt{3}H}\right). \quad (6)$$

The ionization looks as thermal with temperature:

$$T = \frac{\sqrt{3}H}{\pi} \equiv T_{\text{SdS}}. \quad (7)$$

The same result (7) is valid for the general case of arbitrary $C < 1$. This suggests that T_{SdS} is the universal temperature in the SdS environment, which does not depend on the mass of black hole M and is fully determined by the Hubble parameter.

Equation (7) is also valid in the limit when the two horizons merge, and we can compare the activation temperature T_{SdS} with the Bousso–Hawking temperature in Eq. (4). The activation temperature is twice larger, $T_{\text{SdS}} = 2T_{\text{BH}}$. The same takes place for the dS, where the activation temperature T_{dS} measured by stationary observer at $r = 0$ is double the GH temperature, $T_{\text{dS}} = 2T_{\text{GH}} = H/\pi$ [13–17]. The discussion of the possible origin of the doubling of the Hawking temperature in different arrangements see in [14]. See also [18, 19] for dS spacetime.

The activation temperature in dS is not related to the cosmological horizon, so one may suggest that $T = T_{\text{dS}} = H/\pi$ plays the role of the local thermodynamic temperature. All the points in the dS space are equivalent, and thus this temperature is the same for all static observers. Then the energy density at any point of the dS vacuum can be viewed as the thermal energy:

$$\epsilon_{\text{vac}} = \frac{3}{8\pi G}H^2 = \frac{3\pi}{8G}T^2, \quad (8)$$

and the local entropy density is

$$s_{\text{vac}} = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{3\pi}{4G}T = \frac{3}{4G}H, \quad (9)$$

where the free energy density $F = \epsilon_{\text{vac}} - Td\epsilon_{\text{vac}}/dT$. The total entropy in the volume surrounded by cosmological horizon corresponds to the GH entropy:

$$S_{\text{vac}} = \frac{4\pi}{3H^3}s_{\text{vac}} = \frac{\pi}{GH^2} = \frac{A}{4G}. \quad (10)$$

But it is the thermodynamic entropy coming from the local entropy density of the dS quantum vacuum.

Different temperatures for vacuum and for matter have been suggested in [20]. The present temperature H/π of the vacuum is much smaller than the temperature of matter degrees of freedom, $T_{\text{dS}} \sim 10^{-30}T_{\text{CMB}}$.

But the entropy of the vacuum highly exceeds the entropy of matter due to large density of states in the quantum vacuum, $s_{\text{vac}} \sim 10^{30}s_{\text{CMB}}$.

In conclusion, we found that the activation temperature in SdS background, which is measured by the static observer, is universal. It does not depend on the black hole mass M and is fully determined by the Hubble parameter H of the dS expansion, although with different prefactor, $T_{\text{SdS}} = \sqrt{3}H/\pi$. This universal temperature characterizes different processes including the process of ionization of atoms, the decay of the composite particles in the SdS, and all the other scattering or radiation processes, which are not possible in the Minkowski spacetime. We also considered the local thermodynamics of the dS vacuum.

This work has been supported by Academy of Finland (grant 332964).

This is an excerpt of the article ‘‘On the global temperature of the Schwarzschild–de Sitter spacetime’’. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601173

1. A. Yu. Kamenshchik, A. A. Starobinsky, and T. Vardanyan, *Eur. Phys. J. C* **82**, 345 (2022).
2. A. M. Polyakov, arXiv:1209.4135 [hep-th].
3. R. Bousso and S. W. Hawking, *Phys. Rev. D* **54**, 6312 (1996).
4. S. Shankaranarayanan, *Phys. Rev. D* **67**, 084026 (2003).
5. T. R. Choudhury and T. Padmanabhan, *Gen. Rel. Grav.* **39**, 1789 (2007).
6. Y. Qiu and J. Traschen, *Class. Quantum Gravity* **37**, 135012 (2020).
7. E. T. Akhmedov and K. V. Bazarov, arXiv:2212.06433.
8. G. E. Volovik, *Ann. Phys.* **449**, 169219 (2023).
9. A. V. Toporensky and O. B. Zaslavskii, *Eur. Phys. J. C* **83**, 225 (2023).
10. M. K. Parikh and F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5042 (2000).
11. K. Srinivasan and T. Padmanabhan, *Phys. Rev. D* **60**, 024007 (1999).
12. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **69**, 705 (1999).
13. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **90**, 1 (2009).
14. G. E. Volovik, *Universe* **8**, 639 (2022).
15. J. Bros, H. Epstein, and U. Moschella, *JCAP* **0802**, 003 (2008).
16. J. Bros, H. Epstein, M. Gaudin, U. Moschella, and V. Pasquier, *Commun. Math. Phys.* **295**, 261 (2010).
17. D. P. Jatkar, L. Leblond, and A. Rajaraman, *Phys. Rev. D* **85**, 024047 (2012).
18. N. Arkani-Hamed and J. Maldacena, arXiv:1503.08043.
19. P. R. Anderson, E. Mottola, and D. H. Sanders, *Phys. Rev. D* **97**, 065016 (2018).
20. S. N. Vergeles, arXiv:2301.01692.

Острая фокусировка атомного пучка с использованием доплеровского и суб-доплеровского механизмов лазерного охлаждения в двумерной магнито-оптической ловушке

Д. В. Быкова⁺*, А. Е. Афанасьев⁺¹⁾, В. И. Балыкин⁺

⁺Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 мая 2023 г.

После переработки 22 мая 2023 г.

Принята к публикации 22 мая 2023 г.

В работе рассмотрена фокусировка атомного пучка с использованием двумерной магнито-оптической ловушки с целью увеличения количества атомов в области их лазерного охлаждения и локализации вблизи атомного чипа. Рассмотрены два режима взаимодействия атомов с фокусирующим лазерным полем: (1) доплеровский режим взаимодействия, который реализуется при малых отстройках лазерного поля от частоты атомного резонанса и (2) суб-доплеровский режим взаимодействия, который реализуется при больших отстройках лазерного излучения от частоты атомного резонанса. В первом случае в силу диффузии импульса эффективность фокусировки низкая. Показано, что при использовании суб-доплеровского механизма охлаждения диффузия импульса незначительна и, как следствие, увеличение ширины скоростного распределения атомов по поперечным скоростям незначительно. В таком режиме взаимодействия возможна острая фокусировка атомного пучка.

DOI: 10.31857/S1234567823130037, EDN: fzjdgk

1. Введение. Важной задачей при создании квантовых сенсоров является формирование ансамбля ультрахолодных атомов в магнито-оптической ловушке. Такой атомный ансамбль в дальнейшем используется в качестве источника атомов при построении квантового сенсора. Количество атомов в ансамбле определяет точность квантовых сенсоров. По этой причине необходимо формировать ультрахолодные ансамбли как можно с большим количеством атомов. При этом важным является не только количество атомов в магнито-оптической ловушке (МОЛ), но и время, требуемое для создания атомного ансамбля. Существенным параметром в решении данной задачи является величина потока атомов в области их последующего лазерного охлаждения и локализации в МОЛ. Величина потока атомов важна и при формировании атомного ансамбля в МОЛ в схеме с использованием атомного чипа. Эффективная область захвата атомов при их лазерном охлаждении вблизи атомного чипа значительно меньше области захвата в традиционной трехмерной магнито-оптической ловушке. Это связано с отклонением направления вектора магнитного поля МОЛ атомного чипа от квадрупольного [1, 2].

Ранее нами [3] был рассмотрен подход по увеличению потока атомов в области их дальнейшего лазерного охлаждения вблизи атомного чипа на основе фокусировки атомного пучка. Было показано, что использование фокусировки пучка атомов позволяет увеличить поток атомов в 160 раз в геометрии экспериментальной установки, используемой в работе [4]. В основе фокусировки атомного пучка лежит использование двумерной магнито-оптической ловушки атомов (2D-МОЛ) [5]. Пространственная и временная динамика атомов в такой ловушке при определенных параметрах аналогична динамике осциллятора с избыточным демпфированием. Такой режим взаимодействия атомов с 2D-МОЛ приводит к тому, что поперечная скорость атомов на выходе из области взаимодействия с 2D-МОЛ зависит только от поперечной координаты атома и не зависит от начальной поперечной скорости. В силу этого все атомы с одинаковой продольной скоростью фокусируются в одну точку. Наличие в атомном пучке распределения атомов по продольным скоростям приводит к аналогу хроматической аберрации. Было показано, что диаметр фокального пятна составляет 250 мкм при фокусном расстоянии 25 см.

В рассмотренном нами ранее анализе фокусировки атомов не учитывалась диффузия импульса ато-

¹⁾e-mail: afanasiev@isan.troitsk.ru

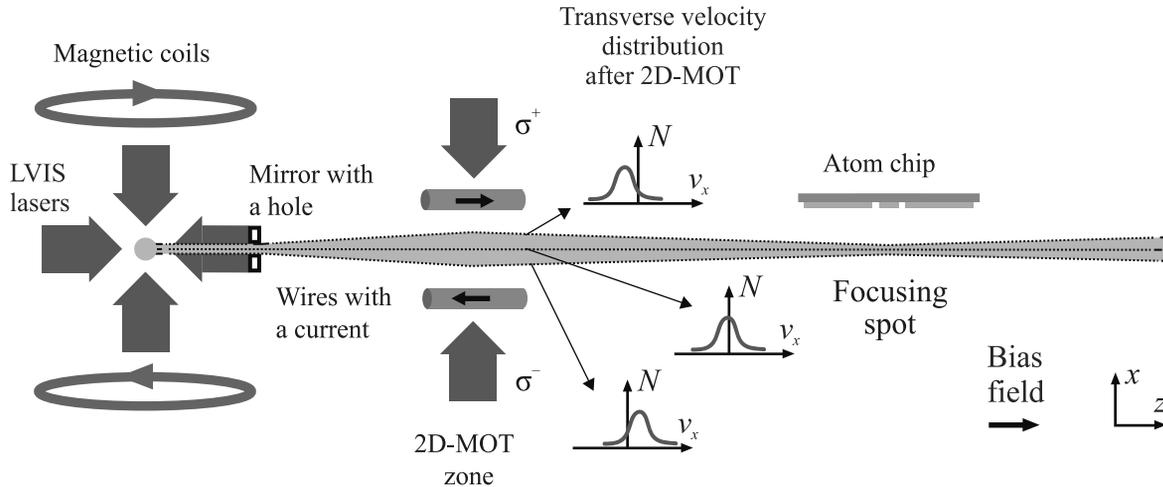


Рис. 1. Принципиальная схема фокусировки атомного пучка, сформированного из низкоскоростного атомного источника, в область локализации атомного чипа. Атомы после прохождения области взаимодействия с 2D-МОЛ обладают распределением по скоростям в поперечном направлении, обусловленным диффузией импульса. Средняя скорость определяется координатой x атома в 2D-МОЛ

мов при взаимодействии с лазерным полем 2D-МОЛ. Диффузия импульса приводит к нагреву атомов и увеличению ширины их скоростного распределения в области выхода из 2D-МОЛ. Это, в свою очередь, может приводить к увеличению поперечного размера атомного пучка в фокусе. В настоящей работе рассмотрено два режима взаимодействия атомов с фокусирующим лазерным полем. (1) Доплеровский режим взаимодействия, который реализуется при малых отстройках лазерного поля от точной частоты атомного резонанса. В этом режиме из-за диффузии импульса атомов эффективность фокусировки при рассмотренных параметрах низкая. (2) Субдоплеровский режим взаимодействия, который реализуется при больших отстройках лазерного излучения. Показано, что при субдоплеровском режиме взаимодействия диффузия импульса атома незначительна, и, как следствие, реализуется эффективная острая фокусировка атомов.

2. Схема фокусировки атомного пучка. Для загрузки МОЛ вблизи атомного чипа (рис. 1) в работе [3] предлагается использовать низкоскоростной атомный пучок [6]. Атомный пучок формируется из трехмерной магнито-оптической ловушки через отверстие диаметром 1 мм в одном из зеркал, формирующих МОЛ. В данной работе рассматривается загрузка ловушки атомного чипа в той же конфигурации, но с использованием фокусировки атомного пучка. Для этого в схеме рис. 1 на расстоянии 7 см от отверстия расположена двумерная магнито-оптическая ловушка (2D-МОЛ). 2D-МОЛ формируется проводниками с током, которые создают требуе-

мый градиент магнитного поля и соответствующими лазерными полями. Данная конфигурация магнитных и лазерных полей 2D-МОЛ может быть использована для фокусировки атомного пучка [7].

Основная идея фокусировки атомов с использованием 2D-МОЛ следующая [5]. Атомы, пройдя через область взаимодействия с лазерными и магнитными полями, изменяют свое направление поперечной скорости. На рисунке 1 схематично представлено распределение атомов по поперечным скоростям на выходе их 2D-МОЛ. Средняя скорость атомов в этой точке определяется координатой x атома в 2D-МОЛ. Изменение направления скорости связано с действием силы светового давления на атомы со стороны лазерного поля. Величина этой силы зависит от поперечной координаты атома в атомном пучке из-за наличия градиента магнитного поля. Эти два фактора, при выполнении условия достаточно долгого нахождения атома в области 2D-МОЛ, обеспечивают независимость длины фокусировки от начальной поперечной скорости [7].

В данной работе область взаимодействия атомов в 2D-МОЛ составляет длину 2 см, а расчетное фокусное расстояние составляет величину 25 см. Такая геометрия обусловлена имеющейся экспериментальной установкой [4].

Существует два основных отличия рассматриваемой конфигурации от конфигурации в эксперименте [7], в котором была продемонстрирована фокусировка с использованием 2D-МОЛ. Первым отличием является величина фокусного расстояния. Фактически в эксперименте [7] была продемонстрирована ко-

роткофокусная атомная линза с фокусным расстоянием 8 см. Вторым отличием является температура атомного пучка. Фокусировка была продемонстрирована для скоростной группы 100 м/с в тепловом пучке. В силу этого диффузия импульса в поперечном направлении не приводила к значительному уширению области фокусировки, которая составила значение порядка 270 мкм.

Следует отметить, что существенной особенностью рассматриваемой атомной линзы является то, что сила, действующая на атомы в поле линзы, является диссипативной по своей природе. В такой линзе при взаимодействии атома с лазерным излучением необходимо учитывать не только изменение скорости атома, но и его диффузию импульса. Это приводит к тому, что атом приобретает дополнительную стохастическую добавку к импульсу на выходе из 2D-МОЛ, а, следовательно, и скорости атомов в направлении оси X получают распределение вблизи средней скорости (схематично представлено на рис. 1). Не трудно показать, что размер атомного пучка Δx в области фокусировки из-за этого эффекта в поперечном направлении будет порядка:

$$\Delta x = \frac{f}{v_z} \Delta v_x, \quad (1)$$

где f – фокусное расстояние, v_z – продольная скорость атомов, а Δv_x – ширина скоростного распределения атомов в поперечном направлении. Ширина скоростного распределения атомов в поперечном направлении определяется доплеровским пределом охлаждения. Для условий эксперимента [7] оценки параметров фокусировки следующие: $f = 0.08$ м, $v_z = 100$ м/с, $\Delta v_x = 0.25$ м/с, $\Delta x = 200$ мкм. Эти значения хорошо согласуются с экспериментальными данными [7].

Из выражения (1) следует, что увеличение фокусного расстояния и уменьшение продольной скорости атомов будет приводить к увеличению размера атомного пучка в области его фокусировки. Так, для геометрии работы [3] и рассматриваемой в настоящей статье, ожидаемый диаметр фокусировки составит значение $\Delta x = 4.5$ мм при значении продольной скорости низкоскоростного атомного пучка $v_z = 14$ м/с.

Из приведенных оценок видно, что при заданной геометрии эксперимента существует две принципиальные возможности уменьшения диаметра пятна фокусировки атомного пучка. Первая заключается в увеличении продольной скорости атомов. Данный подход позволит уменьшить диаметр пятна фокусировки примерно на порядок. Однако, атомные пучки с малой скоростью необходимы как при загрузке

МОЛ атомного чипа, так и при загрузке классических трехмерных МОЛ, так как в них локализуются только атомы, скорость которых меньше критической скорости захвата [8]. Ее величина не превышает значение 100 м/с. По этой причине, увеличение продольной скорости атомного пучка приведет не только к уменьшению диаметра фокусировки атомного пучка, но и к уменьшению количества захваченных атомов.

Другим подходом к уменьшению диаметра сфокусированного пучка может быть подход на основе уменьшения ширины скоростного распределения атомов на выходе из 2D-МОЛ. Этого можно достичь с применением метода суб-доплеровского охлаждения атомов в 2D-МОЛ. При этом ширина скоростного распределения может быть уменьшена на порядок, что приведет к аналогичному уменьшению диаметра пятна фокусировки.

3. Параметры фокусировки атомного пучка с использованием 2D-МОЛ.

3.1. Доплеровский механизм взаимодействия атомов с излучением в 2D-МОЛ. Рассмотрим атом, движущийся вдоль оси Z с продольной скоростью v_z и поперечной v_x . В области 2D-МОЛ атом взаимодействует с лазерным излучением, частота которого отстроена от частоты точного атомного перехода на величину δ . Лазерное излучение формируется двумя лучами: один направлен вдоль оси X , второй – в обратном направлении. Поляризация лазерного излучения – циркулярная. Помимо лазерного поля, в области 2D-МОЛ существует градиент магнитного поля.

Траектории движения атома в 2D-МОЛ может быть определена из решения уравнения Ньютона $\ddot{x}(t) = a_{v_x} v_x(t) + a_x x(t)$ с начальными условиями $x(0) = x_0$, $v_x(0) = v_{x0}$, где $x(t)$ – координата атома вдоль оси x в момент времени t , a_x и a_{v_x} – численные коэффициенты, определяемые действующей на атом в области 2D-МОЛ силой $F_x(x, v_x)$. Коэффициенты являются первыми членами разложения выражения для ускорения атома $a = F_x(x, v_x)/m$ в пределе $x \rightarrow 0$ и $v_x \rightarrow 0$, где m – масса атома.

Для нахождения аналитического решения данного уравнения удобно предположить, что атом не меняет свою координату вдоль оси X при пролете зоны взаимодействия 2D-МОЛ. Это предположение согласуется с результатами численного расчета траекторий движения атомов, которое было рассмотрено в [3]. Для определения точки фокусировки на оси Z необходимо определить скорость v_x атомов на выходе из зоны взаимодействия. Для этого можно рассмотреть решение уравнения $\dot{v}_x(t) = a_{v_x} v_x(t) + a_x x_0$. Мож-

но показать, что при условии $a_{v_x} < 0$ и $|a_{v_x}| \gg L/v_z$ фокусное расстояние f будет определяться выражением:

$$f = \frac{a_{v_x}}{a_x} v_z. \quad (2)$$

Как было показано в работе [3], при доплеровском режиме лазерного охлаждения атомов условие $a_{v_x} < 0$ выполняется при выборе отстройки $\delta < 0$ относительно частоты атомного перехода. Условие $|a_{v_x}| \gg L/v_z$ выполняется при использовании низкоскоростных атомных пучков для длин взаимодействия с 2D-МОЛ более 2 мм. При рассмотрении доплеровского режима взаимодействия атомов с лазерным полем можно ограничиться случаем атомов с полным моментом основного состояния $F_g = 0$ и возбужденного $F_e = 1$. В этом случае сдвиг частоты перехода, вызванный эффектом Зеемана, будет описываться выражением $\omega_e(x) = \frac{\mu_B g_e}{\hbar} g x$, где μ_B – магнетон Бора, g_e – фактор Ланде возбужденного состояния, а g – градиент магнитного поля вдоль оси x ($g = dB/dx$).

В этом случае сила, действующая на атом, будет определяться выражением:

$$F_x(x, v_x) = -\hbar k \gamma G \left(\frac{1}{1 + G + \left(\frac{\delta + k v_x + \omega_e(x)}{\gamma} \right)^2} - \frac{1}{1 + G + \left(\frac{\delta - k v_x - \omega_e(x)}{\gamma} \right)^2} \right), \quad (3)$$

где γ – полуширина резонансной линии поглощения атома, G – параметр насыщения атомного перехода, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – модуль волнового вектора лазерного поля.

Линеаризуя данное выражение при $x \rightarrow 0$ и $v_x \rightarrow 0$, можно получить для параметров a_x и a_{v_x} следующие выражения:

$$a_x = 4k\gamma^3 \frac{G\delta\mu_B g_e g}{m((1+G)\gamma^2 + \delta^2)^2}; \quad (4)$$

$$a_{v_x} = 4\hbar k^2 \gamma^3 \frac{G\delta}{m((1+G)\gamma^2 + \delta^2)^2}.$$

Используя (2) и (4), получаем для фокусного расстояния выражение:

$$f = \frac{\hbar k v_z}{\mu_B g_e g}. \quad (5)$$

Из (5) следует, что при доплеровском механизме взаимодействия атомов с 2D-МОЛ отсутствует зависимость фокусного расстояния от отстройки частоты лазерного излучения от резонансной линии поглощения атома. Фокусное расстояние для атомов с типичной поперечными и продольной скоростями

$v_{x_0} = 1$ см/с и $v_z = 14$ м/с при величине градиента магнитного поля $g = 0.51$ Гс/см равно $f = 25$ см.

3.2. Суб-доплеровский механизм взаимодействия атомов с излучением в 2D-МОЛ. При переходе к суб-доплеровскому механизму взаимодействия атомов с 2D-МОЛ картина фокусировки пучка атомов отличается. Для определения параметров a_x и a_{v_x} воспользуемся приближением неподвижного атома вблизи начала координат. Для возникновения суб-доплеровского механизма взаимодействия атома с лазерным полем рассмотрим атом с полным моментом основного состояния $F_g = 1$ и возбужденного $F_e = 2$. В этом случае основное состояние состоит из трех уровней, а возбужденное из пяти, т.е. конфигурация уровней (3 + 5). Если пренебречь многочастичными переходами, то силы взаимодействия такого атома с лазерным полем будут эквивалентны случаю атома с конфигурацией (5 + 7), которая отвечает атому ^{87}Rb на переходе $F_g = 2 \rightarrow F_e = 3$, используемого в качестве циклического перехода при охлаждении и локализации атомов в магнито-оптических ловушках. В этом случае силу можно линеаризовать по координате и скорости [9] и получить следующие выражения для a_x и a_{v_x} :

$$a_x = -\frac{5}{748} \frac{g k \mu_B \gamma^3 G |\delta| (17\gamma^2 G g_g + 176(3g_e - g_g)\mu^2)}{(\delta^2 + \gamma^2)^2 \mu^2 M}; \quad (6)$$

$$a_{v_x} = -\frac{5}{748} \frac{\hbar k^2 \gamma^3 G |\delta| (17\gamma^2 G + 357\mu^2)}{(\delta^2 + \gamma^2)^2 \mu^2 M},$$

где параметр μ определяется выражением:

$$\mu = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{17}{33}} \frac{G \gamma^2 \sqrt{5\gamma^2 + \delta^2}}{\gamma^2 + \delta^2}.$$

Тогда выражение для фокусного расстояния принимает вид:

$$f = \frac{\hbar k}{g \mu_B} \frac{17G\gamma^2 + 352\mu^2}{176\mu^2(3g_e - g_g) + 17G\gamma^2 g_e} v_z. \quad (7)$$

Фокусное расстояние, определяемое выражением (7), зависит от отстройки лазерного излучения от частоты атомного перехода, поскольку от нее зависит параметр μ . Так же от отстройки частоты лазерного излучения зависит и ширина скоростного распределения. В предположении, что $\delta \gg \gamma\sqrt{G}$, температура атомов T будет определяться выражением [10, 11]:

$$T = \frac{\hbar \gamma^2}{4\delta k_B} G. \quad (8)$$

Пользуясь выражением (8), можно оценить ожидаемую величину перетяжки сфокусированного

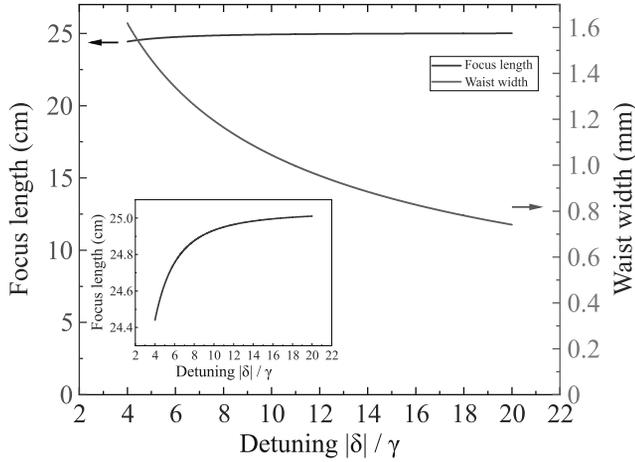


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость фокусного расстояния при суб-доплеровском механизме взаимодействия атомов с фокусирующим лазерным полем (черная кривая) и оценка ожидаемого размера перетяжки сфокусированного атомного пучка, ограниченной диффузией импульса для моноскоростного атомного пучка (красная кривая) от отстройки частоты фокусирующего лазерного излучения. На вставке представлена та же зависимость фокусного расстояния в увеличенном масштабе

атомного пучка при фокусной длине 25 см. На рисунке 2 представлены зависимости фокусного расстояния и величины перетяжки в зависимости от величины отстройки δ при $G = 1$. Значения представлены для отстройки частоты лазерного излучения $\delta < -4\gamma$, при которой выполняется условие суб-доплеровского взаимодействия. Из рисунка 2 видно, что зависимость фокусного расстояния от частоты отстройки лазерного излучения от резонанса носит слабый характер и практически не изменяется при больших отстройках. При этом размер перетяжки уменьшается с увеличением отстройки. Это связано с тем фактом, что ширина проекции скоростного распределения атомов на ось X уменьшатся. Из рисунка 2 видно, что при больших отстройках возможна фокусировка в диаметр менее одного миллиметра.

4. Пространственное распределение атомов в фокальной плоскости. Проведенные выше расчеты сделаны для моноскоростного атомного пучка. Учет распределения скоростей атомов не только по оси X , но и в продольном направлении (ось Z) приводит к дополнительному увеличению размера фокального пятна. Для более точного анализа фокусировки атомов и учета диффузии импульса атома необходимо рассмотреть эволюцию функции распределения атомов $w(t, x, z, v_x, v_z)$. Эволюция данной функции описывается уравнением Фоккера–Планка [12].

Решение уравнение Фоккера–Планка рассмотрим только в области взаимодействия атомов с лазерным излучением, т.е. в области 2D-МОЛ. Распространение атомного пучка в области до 2D-МОЛ и после может быть рассмотрено с использованием кинетических уравнений, поскольку в данных областях отсутствует лазерное поле и, следовательно, отсутствует диффузия импульса.

В области 2D-МОЛ можно считать, что изменение координаты x не происходит, поскольку область взаимодействия мала. Так же можно не учитывать изменение продольной скорости v_z , поскольку сила вдоль оси Z в области 2D-МОЛ отсутствует, а изменение скорости v_z вследствие диффузии импульса будет лежать внутри первоначальной ширины скоростного распределения атомов по продольным скоростям. Эта ширина скоростного распределения определяется доплеровским режимом охлаждения атомов в МОЛ, используемой для формирования низкоскоростного атомного пучка. В силу этого диффузия импульса вдоль оси Z не приведет к уширению пятна фокусировки. Можно исключить и зависимость скорости атомов от координаты z , поскольку отсутствует сила вдоль оси Z . При сделанных предположениях функция распределения зависит только от t и v_x : $w(t, x, z, v_x, v_z) = w(t, v_x)$. Эволюцию данной функции достаточно рассмотреть только на временном интервале $T = L/v_z$. Учет скоростного распределения атомов по продольным скоростям v_z может быть сделан нормировкой функции $w(t, v_x)$ на количество атомов $\int_{-\infty}^{\infty} w(t, v_x) dv_x |v_z dv_z = M(v_z) dv_z$, где $M(v_z)$ – максвелловский контур распределения атомов по продольным скоростям с температурой T_z . Таким образом, для рассмотрения эволюции функции распределения достаточно решить следующее уравнение:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v_x} \left(\frac{F_x}{m} w \right) + \frac{\partial^2}{\partial v_x^2} \left(\frac{D_{xx}}{m^2} w \right), \quad (9)$$

где v_x – проекция скорости атома на ось x , F_x – сила, действующая на атомы в области 2D-МОЛ, D_{xx} – тензор диффузии импульса атома, m – масса атома. Тензор диффузии импульса атома при взаимодействии с 2D-МОЛ при доплеровском режиме взаимодействия имеет вид [13]

$$D_{xx}(x, v_x) = -0.7\hbar^2 k^2 \gamma G \left(\frac{1}{1 + G + \left(\frac{\delta + kv_x + \alpha gx}{\gamma} \right)^2} + \frac{1}{1 + G + \left(\frac{\delta - kv_x - \alpha gx}{\gamma} \right)^2} \right). \quad (10)$$

При суб-доплеровском режиме взаимодействия с 2D-МОЛ тензор диффузии импульса будет описываться выражением [14]:

$$D_0 = D_{xx}(0, 0) = -\frac{23}{17}\hbar^2 k^2 \gamma \frac{G\gamma^2}{\delta^2}. \quad (11)$$

Уравнение (9) может быть решено численно при следующих предположениях. Низкоскоростной атомный пучок формируется в трехмерной МОЛ, в одном из зеркал которой сделано отверстие диаметром 1 мм, которое служит входной апертурой атомного пучка при фокусировке и локализации атомов вблизи атомного чипа. Данное отверстие формирует геометрию атомного пучка. Продольное скоростное распределение предполагается как максвелловское с температурой $T_z = 15$ мК вблизи среднего значения скорости $v_{z_0} = 14$ м/с. Такое значение скорости характерно для низкоскоростных атомных пучков атомов рубидия [6]. Поперечное распределение определяется диафрагмированием атомного пучка. Использованное в расчете распределение поперечной скорости задавалось как максвелловское распределение с температурой $T_x = 250$ мК вблизи значения $v_{x_0} = 0$ м/с.

От выходной апертуры до области взаимодействия с 2D-МОЛ атомы свободно распространяются. Для численного решения необходимо задать распределение поперечной скорости в плоскости непосредственно перед 2D-МОЛ. Нетрудно видеть, что в каждой точке этой плоскости скоростное распределение по v_x зависит от продольной скорости v_z . Искомое распределение будет являться кусочно-заданной функцией координаты x и скорости v_x :

$$w_0(x, v_x) = \begin{cases} 0, & v_x < \frac{x - r_0}{l} v_z; \\ \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_x}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T_x}\right), & \frac{x - r_0}{l} v_z < v_x < \frac{x + r_0}{l} v_z; \\ 0, & v_x > \frac{x + r_0}{l} v_z. \end{cases}$$

где r_0 – это начальная координата по оси X у входной апертуры, а l – длина распространения пучка от входной апертуры до зоны взаимодействия с 2D-МОЛ. Данное значение $w_0(x, v_x)$ будет являться начальным для решения уравнения (9).

Уравнение Фоккера–Планка решалось для области взаимодействия атомов с 2D-МОЛ длиной $L = 2$ см. Скоростные распределения по v_z и v_x разбивались на области с малым шагом, и уравнение

численно решались для каждого получившегося набора v_z и v_x , а также для всех начальных координат атомов r_0 в пределах входной апертуры. Уравнения решались как для случая доплеровского режима взаимодействия атомов с 2D-МОЛ, так и при суб-доплеровском режиме.

В ходе решения уравнения Фоккера–Планка определялось распределение атомов по поперечным скоростям в зависимости от координаты x для каждой из скоростных групп с продольной скоростью v_z на выходе из зоны взаимодействия с 2D-МОЛ. Атомы с полученным распределением поперечной скорости свободно распространялись до фокальной плоскости. Для расчета результирующего пространственного распределения атомов область фокальной плоскости разбивается на ячейки, в каждой из которой суммируется количество атомов, дошедшее до нее.

На рисунке 3 представлено распределение атомов вдоль оси X в фокальной плоскости для трех случаев: (1) отсутствие фокусировки (черная кривая), (2) при фокусировке в 2D-МОЛ с доплеровским механизмом охлаждения (красная кривая) и (3) при фокусировке в 2D-МОЛ с суб-доплеровским механизмом охлаждения (синяя кривая). Параметры лазерного поля и величины градиента магнитного поля выбирались таким образом, чтобы фокусное расстояние было равно 25 см. Представленные функции нормированы на единичную площадь под кривой.

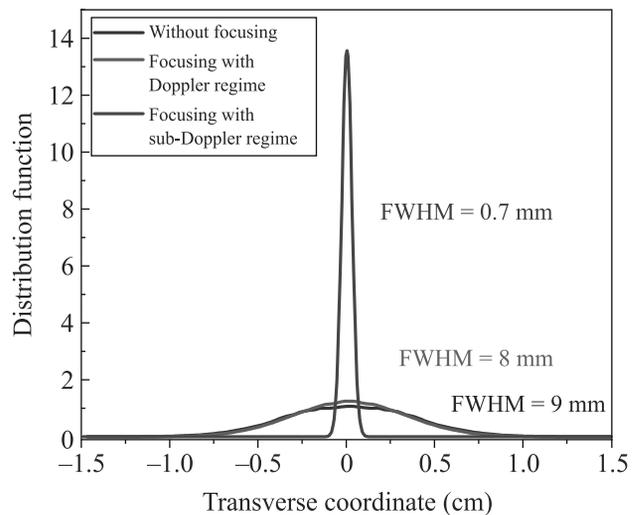


Рис. 3. (Цветной онлайн) Функция пространственного распределения плотности атомов вдоль поперечной оси X в фокальной плоскости: (1) без фокусировки (черная кривая); (2) фокусировка в 2D-МОЛ при доплеровском режиме охлаждения (красная кривая); (3) фокусировка в 2D-МОЛ при суб-доплеровском механизме охлаждения (синяя кривая)

Из рисунка 3 видно, что при свободном распространении пучка холодных атомов в отсутствие фокусировки ширина пространственного распределения атомов вблизи области локализации чипа составляет 9 мм (черная кривая). При использовании же фокусировки атомного пучка с помощью 2D-МОЛ с доплеровским режимом охлаждения (с отстройкой лазерного излучения относительно частоты точного резонанса $\delta = -4\gamma$, параметром насыщения $G = 10$ и градиентом магнитного поля $g = 0.51$ Гс/см [3]) ширина сфокусированного пучка сужается незначительно до 8 мм (красная кривая).

Суб-доплеровский режим взаимодействия атомов с 2D-МОЛ рассматривался при следующих параметрах: отстройка частоты лазерного излучения $\delta = -20\gamma$, параметр насыщения $G = 1$ и градиент магнитного поля $g = 0.93$ Гс/см. В этом случае пространственное распределение атомов по координате X в фокальной плоскости имеет характерную ширину 0.7 мм (синяя кривая), что позволяет говорить об эффективной фокусировке атомного пучка в область локализации чипа.

Физическим смыслом функции пространственного распределения атомов, представленной на рис. 3 является распределение локальной концентрации атомов. Действительно, из условия нормировки представленных кривых, количество атомов в элементе dx определяется выражением: $dn = N_0 n(x) dx$, где $n(x) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty w(x, z, v_x, v_z) dv_x dv_z |_{z=f}$ – функция распределения, представленная на рис. 3. Из проведенных расчетов следует, что локальное увеличение плотности атомов, при фокусировке в суб-доплеровском режиме взаимодействия в рассматриваемом одномерном случае, достигает 13 раз. При рассмотрении двумерной фокусировки, локальное увеличение плотности достигает 169 раз.

5. Заключение. В работе представлен анализ возможности фокусировки атомного пучка с использованием двумерной магнито-оптической ловушки с целью увеличения атомов в области охлаждения и локализации вблизи атомного чипа.

В работе рассмотрено два режима взаимодействия атомов с фокусирующим лазерным полем. Доплеровский режим взаимодействия, который реализуется при малых отстройках лазерного поля от точной частоты атомного резонанса. В этом режиме в силу диффузии импульса эффективность фокусировки при рассмотренных параметрах низкая: размер области фокусировки составил значение 8 мм при параметрах, которые могут быть реализованы в экспериментальных условиях [4]. При больших отстройках лазерного излучения характер взаимодей-

ствия атомов с лазерным полем изменяется. Существенным становится суб-доплеровский механизм взаимодействия. Это приводит к уменьшению диффузии импульса и, как следствие, к уменьшению ширины скоростного распределения атомов по поперечным скоростям. В таком режиме взаимодействия расчетная область фокусировки составила значение 0.7 мм.

Увеличение плотности атомов в фокальной плоскости при двумерной фокусировке достигает 169 раз по сравнению со случаем, когда фокусировка отсутствует. Уменьшение области фокусировки, а следовательно, и увеличение плотности, может быть достигнуто за счет уменьшения фокусного расстояния. При этом использование суб-доплеровского механизма взаимодействия может позволить производить фокусировку атомов в область с размерами порядка 100 мкм.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-12-00323, <https://rscf.ru/project/21-12-00323/> и частично в рамках проекта Госзадания FFUU-2021-0003.

1. S. Wildermuth, P. Krüger, C. Becker, M. Brajdic, S. Haupt, A. Kasper, R. Folman, and J. Schmiedmayer, *Phys. Rev. A* **69**, 030901 (2004).
2. V. Singh, V. B. Tiwari, K. A. P. Singh, and S. R. Mishra, *J. Mod. Opt.* **65**(21), 2332 (2018).
3. A. E. Afanasiev, D. V. Bykova, P. I. Skakunenko, and V. I. Balykin, *JETP Lett.* **115**, 509 (2022).
4. A. E. Afanasiev, A. S. Kalmykov, R. V. Kirtaev, A. A. Kortel, P. I. Skakunenko, D. V. Negrov, and V. I. Balykin, *Opt. Laser Technol.* **148**, 107698 (2022).
5. V. I. Balykin, *JETP Lett.* **66**, 349 (1997).
6. Z. T. Lu, K. L. Corwin, M. J. Renn, M. H. Anderson, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **77**(16), 3331 (1996).
7. P. N. Melentiev, P. A. Borisov, S. N. Rudnev, A. E. Afanasiev, and V. I. Balykin, *JETP Lett.* **83**(1), 14 (2006).
8. A. M. Steane, M. Chowdhury, and C. J. Foot, *J. Opt. Soc. Am. B* **9**(12), 2142 (1992).
9. S. Chang, T. Y. Kwon, H. S. Lee, and V. G. Minogin, *Phys. Rev. A* **60**, 3148 (1999).
10. C. Salomon, J. Dalibard, W. D. Phillips, A. Clairon, and S. Guellati, *EPL* **12**, 683 (1990).
11. S. A. Hopkins, *PhD thesis, The Open University*, Milton Keynes, England (1996).
12. V. S. Letokhov and V. G. Minogin, *Phys. Rep.* **73**, 1 (1981).
13. S. Chang and V. G. Minogin, *Phys. Rep.* **365**, 65 (2002).
14. J. W. Jun, S. Chang, T. Y. Kwon, H. S. Lee, and V. G. Minogin, *Phys. Rev. A* **60**, 3960 (1999).

Strong coupling of exciton in organic material and plasmonic WGM localized on the surface of silver nanoparticles

A. V. Belonovskii⁺, V. P. Evtikhiev^{+*1)}, M. I. Mitrofanov*, V. V. Nikolaev*

⁺ITMO University, 197101 St. Petersburg, Russia

*Ioffe Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

Submitted 27 April 2023

Resubmitted 23 May 2023

Accepted 23 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823130049, EDN: fzpqom

The current research explores the interaction between plasmonic whispering gallery modes (WGM) on silver nanospheres' surfaces and an exciton in the surrounding organic medium. The study aims to explore the potential for achieving strong coupling between plasmon modes localized on spherical metal particles' surfaces and an exciton in an organic material. Considering a microsphere of radius r_0 with permittivity ε_1 surrounded by a medium with permittivity ε_2 , matching the tangential field components at the media interface results in an equation for eigenmodes. The interaction between the obtained plasmon modes and excitons in the organic material is described by a Hamiltonian, which involves exciton and plasmon creation and annihilation operators and coupling between plasmon and exciton. The study takes into account that the organic exciton will interact with several plasmon modes.

Silver was chosen as the material for spherical metal particles in this study, with its refractive index described by the Drude model that takes plasma oscillations of electrons into account. For the organic material, DPAVBi (4, 4'-bis[4-(di-p-tolylamino)styryl]biphenyl) [1] was used due to its high oscillator strength. The investigation involved solving the problem for different metal particle radii, which resulted in obtaining a collection of WGMs for each radius considered. Field distribution demonstrate that the fields focus on the metal surface, suggesting potential for a strong interaction. Two special modes appear at the energy edges, where the dissipation tends towards that of the exciton mode, indicating an increase in exciton contribution to the polariton mode. This phenomenon is consistent with previous observations [2] and suggests that polariton modes with a larger exciton contribution produce more intense radiation, hence the potential for

strong coupling. Spectra resulting from the interaction of an “absorbing” exciton in DPAVBi with plasmon modes localized on the metal sphere were calculated for various radii (Fig. 1). For larger radii, the Rabi splitting increases, and two main peaks appear. It was observed that as the radius increases, the intensity of the emitted radiation decreases, imposing constraints on finding the optimal sphere radius that provides both sufficient radiation intensity and a large Rabi splitting.

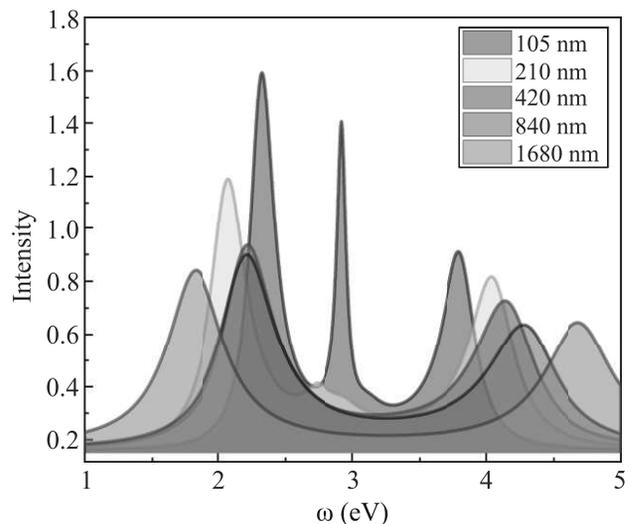


Fig. 1. (Color online) Theoretical spectra formed as a result of the interaction of the “absorbing” exciton mode in the organic material DPAVBi and plasmon modes formed on the surface of a silver spheres of different diameters

Thus, for sufficiently large radii of metallic spheres, the dense spectrum of surface plasmon modes can effectively interact with excitons in the organic material surrounding the sphere. This can result in significant modification of both absorption and radiation characteristics of the system. These observations highlight the

¹⁾e-mail: leha.s92.92@gmail.com, evtikhiev@mail.ioffe.ru

potential of such hybrid systems for a range of applications in optoelectronics and photonics.

This is an excerpt of the article “Strong coupling of exciton in organic material and plasmonic WGM localized on the surface of silver nanoparticles”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601562

1. K.M. Morozov, P. Pander, L.G. Franca, A.V. Belonovski, E.I. Girshova, K.A. Ivanov, D.A. Livshits, N.V. Selenin, G. Pozina, A.P. Monkman, and M.A. Kaliteevski, *J. Phys. Chem. C* **125**(15), 8376 (2021).
2. A.V. Belonovski, K.M. Morozov, E.I. Girshova, G. Pozina, and M.A. Kaliteevski, *Opt. Express* **29**, 20724 (2021).

Формирование фемтосекундных импульсов произвольной формы при помощи одномерного фотонного кристалла с непрерывной пространственной модуляцией показателя преломления

С. Е. СВЯХОВСКИЙ¹⁾

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

Поступила в редакцию 5 мая 2023 г.

После переработки 23 мая 2023 г.

Принята к публикации 24 мая 2023 г.

Теоретически рассмотрен алгоритм построения структуры одномерного фотонного кристалла, при отражении от которого фемтосекундный световой импульс с гауссовой огибающей преобразуется в импульс с огибающей произвольной заданной временной зависимости. Метод проиллюстрирован на примере прямоугольного импульса. Приведены примеры для простых форм импульса, оценено влияние оптического поглощения и предложен способ его компенсации.

DOI: 10.31857/S1234567823130050, EDN: fzyrbg

Введение. Устройства для управления формой фемтосекундных импульсов востребованы во многих областях науки. Модулированные импульсы используются для управления химическими реакциями [1], в приложениях квантовой оптики [2], при генерации когерентных фотонов [3], в исследованиях молекулярной электронной плотности [4] и молекулярной фрагментации [5], генерации сверхкоротких импульсов [6] и в других приложениях.

Благодаря большой востребованности, задача формирования импульсов света с произвольной огибающей актуальна уже на протяжении более 35 лет [7, 8]. Существует несколько техник для формирования огибающей импульсов [9]. Как правило, эти техники основаны на спектральном разложении исходного импульса, модуляции отдельных спектральных компонент по амплитуде и/или фазе и объединении спектральных компонент в новый импульс нужной формы [10]. Экспериментально для спектрального разложения и обратной сборки импульса используются пары призм, дифракционных решеток или других дисперсионных элементов, объединенных в так называемую $4f$ -систему [11]. В промежутке между дисперсионными элементами разные спектральные компоненты импульса распространяются по разным пространственным траекториям. Компоненты проходят через многоканальный модулятор, в качестве которого могут быть использованы жидкокристаллические матрицы [12, 13], акустооптические фильтры [14], деформиру-

емые зеркала [15], а также цифровые микрозеркала [16], используемые сегодня в проекторах.

С теоретической точки зрения [9, 17] формирование огибающей фемтосекундных импульсов представляет собой преобразование Фурье желаемой функции огибающей импульса и получение спектральных коэффициентов ее разложения. Однако, пространственные модуляторы и другие компоненты $4f$ -систем могут иметь сложный спектральный отклик, связь между амплитудой и фазой и другие технические нюансы, которые требуется учесть в расчетах. Поэтому применяются более сложные техники, использующие подбор фаз и амплитуд при помощи эволюционных алгоритмов [18, 19], нейронных сетей [20, 21] и других алгоритмов машинного обучения.

$4f$ -системы достаточно громоздки, собираются на оптическом столе из дорогих компонент и чувствительны к настройке, поэтому ведутся поиски альтернативных способов формирования фемтосекундных импульсов. Например, используются массивы chirpированных брэгговских волокон [22], и волноводы, изготовленные прямой лазерной записью [23], метаматериалы и метаповерхности [25], нанопланшетные [26]. Тонкие фотонные кристаллы используются для chirpирования лазерных импульсов [27].

В этой работе мы предлагаем идею управления формой фемтосекундного импульса при его отражении от фотонного кристалла с модуляцией показателя преломления в виде суммы гармонических функций. Идея состоит в селективном управлении амплитудой и фазой спектральных компонент импуль-

¹⁾e-mail: sse@shg.ru

са при помощи амплитуды и фазы соответствующих гармонических функций. Предлагаемая схема работает на отражение от единственного оптического элемента, не требует фокусировки света, а потому пригодна для формирования импульсов большой мощности.

Постановка задачи. Рассмотрим прозрачную среду оптической толщиной L с показателем преломления $n_0 = 1.5$ и плоскими границами раздела. Пусть свет распространяется только вдоль нормали к границам: задача одномерная. Ось x направлена вдоль нормали, в целях удобства вычислений координаты внутри среды отсчитываются в единицах оптического пути. Показатель преломления среды может отклоняться от среднего значения и иметь некоторую зависимость $n(x)$.

Пусть задана функция $F(t)$, вещественная, непрерывная, с ограниченным спектром. Требуется найти такую функцию $n(x)$, чтобы при падении на среду оптического импульса с гауссовой огибающей отраженный импульс имел огибающую, соответствующую функции $F(t)$.

Решение. Введем в этой среде пространственную модуляцию показателя преломления в виде одной гармонической функции :

$$n_1(x) = n_0 + A_1 \cos(k_1 x + \phi_1), \quad (1)$$

где A_1 , ϕ_1 , k_1 – амплитуда, фаза и волновой вектор (в случае одномерной задачи – волновое число) пространственной решетки показателя преломления. Известно (см., например, [28]), что падающая волна, имеющая волновой вектор вдвое меньше k_1 по модулю, будет испытывать дифракционное отражение от этой решетки, так как к волновому вектору волны прибавляется волновой вектор решетки, в результате чего направление движения волны меняется на обратное. Амплитуда и фаза отраженной волны при этом будут пропорциональны амплитуде и фазе модуляции решетки показателя преломления.

Выберем функцию $F(t)$. Для иллюстрации рассмотрим оптический импульс длительностью 800 фс и центральной длиной волны $\lambda_0 = 800$ нм с прямоугольной огибающей (рис. 1а). Найдем спектр этого импульса. Согласно свойствам преобразования Фурье, спектр будет иметь вид Фурье-образа $F(\omega)$, смещенного на частоту оптических колебаний световой волны $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, где c – скорость света. График модуля комплексной функции $F(\omega - \omega_0)$ показан на рис. 1б, для наглядности вместо частотной зависимости на графике показана зависимость от длины волны, т.е. $F(2\pi c/\lambda - 2\pi c/\lambda_0)$.

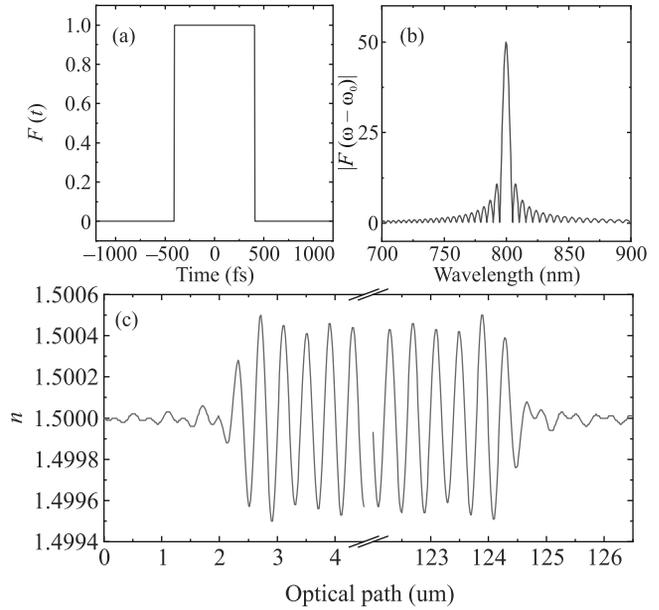


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пошаговая иллюстрация метода: (а) – желаемая форма огибающей оптического импульса; (б) – спектр импульса с этой огибающей; (с) – структура ФК, построенная согласно предлагаемому методу, показаны первые и последние 4 мкм

Каждой Фурье-компоненте функции $F(\omega - \omega_0)$ поставим в соответствие пространственную гармонику

$$n_\omega(x) = n_0 + \delta n \cdot A_\omega \cos\left(\frac{2\omega x}{c} + \phi_\omega\right), \quad (2)$$

где положим амплитуду и фазу гармоники равной амплитуде и фазе Фурье-компоненты:

$$A_\omega = |F(\omega - \omega_0)|, \phi_\omega = \arg F(\omega - \omega_0). \quad (3)$$

Множитель 2 в аргументе косинуса в уравнении (2) обозначает, что пространственная решетка имеет вдвое больший волновой вектор, чем отраженная волна. Величина δn – коэффициент модуляции, для примера взятый равным 0.0005.

Теперь объединим все пространственные гармоники и получим:

$$n(x) = n_0 + \delta n \int_{-\infty}^{\infty} A_\omega \cos\left(\frac{2\omega x}{c} + \phi_\omega\right) d\omega. \quad (4)$$

Рассмотрение зависимости $n(x)$ от оптической толщины x позволяет учесть дисперсию среды, в этом случае в подынтегральном выражении следует учесть зависимость показателя преломления в оптическом пути x_ω от частоты.

Пример зависимости $n(x)$ для прямоугольного импульса показан на рис. 1с, зависимость имеет вид

квазигармонической функции, представляющей собой сумму гармонических функций с близкими частотами. Задача решена.

Преобразование Фурье вычислялось по алгоритму Fast Fourier Transform, при расчете временных характеристик использовалось 8192 точек по времени с шагом 1 фс.

Проверка решения. Теперь по известной зависимости $n(x)$ найдем функцию временного оптического отклика этой среды на падающий импульс с гауссовой огибающей. Это реализуется при помощи комбинации известных методов. Вначале найдем спектр коэффициента отражения этой структуры. Для произвольных функций $n(x)$ удобнее всего находить спектр методом матриц распространения [29] или рекуррентным методом [30]. Приведем $n(x)$ к дискретному виду, аппроксимировав ее кусочно-постоянной функцией, что физически эквивалентно разделению оптической среды на слои. Корректность применения этой аппроксимации обсуждалась в [31]. Выберем шаг по координате δx много меньше оптической длины волны. В этой работе использовалось значение $\delta x = 20$ нм. Координаты могут принимать значения $x_j = j \cdot \delta x$, таким образом, показатели преломления слоев равны $n_j = n(x_j)$, а их геометрические толщины $d_j = \delta x/n_j$. Исходя из набора n_j , d_j , матричным методом вычислялся спектр амплитуды комплексного коэффициента отражения $r(\lambda)$. Модуль этой величины показан на графике рис. 2а. Хорошо видно, что график $|r(\lambda)|$ очень похож на график спектра функции F .

Спектр коэффициента отражения модулированной среды имеет сравнительно небольшое максимальное значение 0.15, кроме того, большая часть (по площади под графиком) спектра исходного импульса попадает в области еще более низкого коэффициента отражения. Таким образом, большая часть исходного сигнала пройдет сквозь среду. Это объясняется малой амплитудой модуляции $\delta n = 0.0005$. Для увеличения эффективности преобразования можно повысить эту величину, но в целях иллюстрации метода достаточно и этого значения.

Теперь вычислим отклик этой многослойной структуры на импульс с гауссовой огибающей $G(t)$ (рис. 2б, для примера длительность импульса выбрана 30 фс). Расчет выполняется известным методом спектрального разложения [9]. А именно, найдем Фурье-образ импульса $G(\omega - \omega_0)$ (рис. 2а), после чего домножим каждую Фурье-компоненту на коэффициент отражения $r(2\pi c/\omega)$ и выполним обратное преобразование Фурье, чтобы получить временную форму огибающей импульса, отраженного от среды:

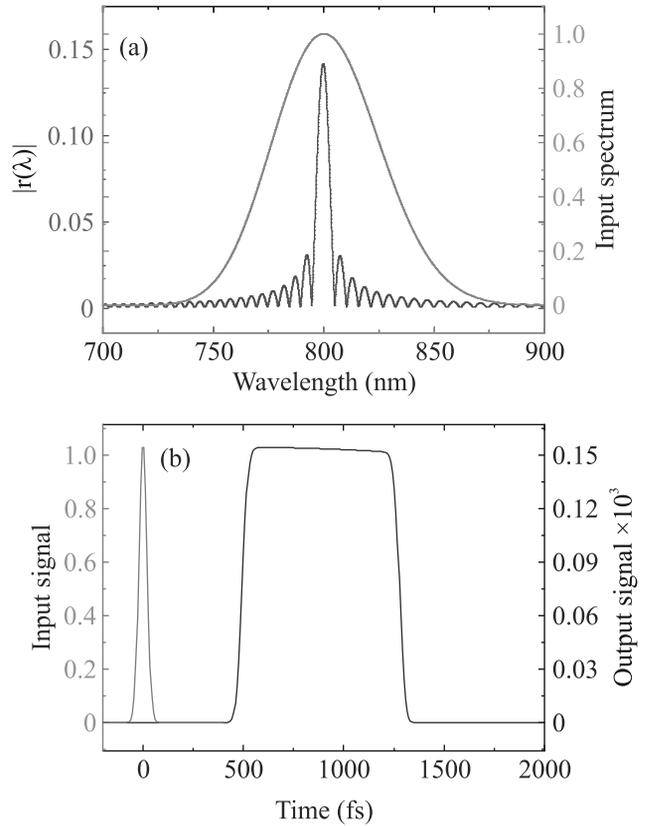


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – спектр коэффициента отражения модулированной среды в сравнении со спектром входного сигнала (амплитудные значения); (б) – интенсивности огибающих входного и выходного сигнала

$$S(t) = \int_{-\infty}^{\infty} r(2\pi c/\omega) G(\omega - \omega_0) e^{i\omega t} d\omega. \quad (5)$$

Результат вычисления показан на рис. 2б. Временная зависимость огибающей имеет вид прямоугольной функции со сглаженными фронтами и длительностью на полувысоте 780 фс, что повторяет форму функции $F(t)$.

Результаты и обсуждение. Можно заметить на рис. 2б, что фронты получившегося импульса сглаженные, а конкретнее, время нарастания с уровня 20 до 80 % составило 30 фс. Причина этого в том, что исходная функция $F(t)$ имеет неограниченный спектр: ее фронты абсолютно резкие, а спектр входного импульса имеет гауссову форму и быстро затухает при отдалении от центральной частоты. Поэтому во входном импульсе отсутствуют нужные гармоники для формирования достаточно резких фронтов, соответственно по формуле (5) эти гармоники будут отсутствовать и в выходном.

На рисунке 3 показано, как меняется передний

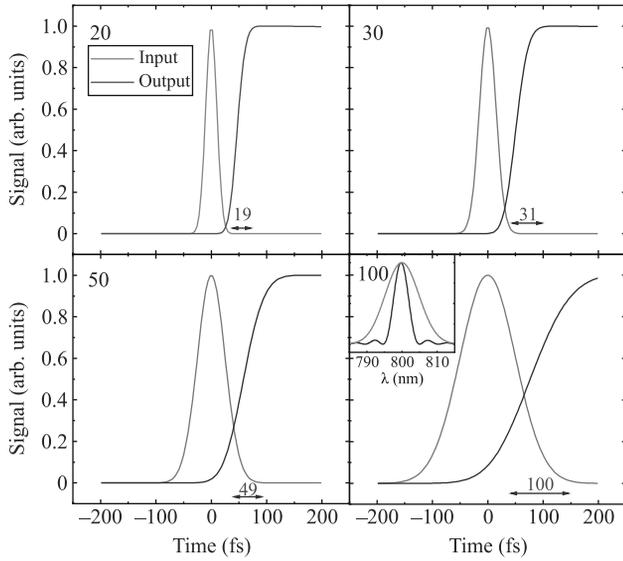


Рис. 3. (Цветной онлайн) Интенсивности огибающих входного и выходного сигнала (показан передний фронт, выходной импульс сдвинут во времени для наглядного сравнения со входным) при варьировании длительности входного импульса, равной 20, 30, 50, 100 фс. Вставка: сравнение спектров отражения оптической среды и исходного импульса

фронт выходного импульса при увеличении длительности входного. Фронт импульса становится более сглаженным, время нарастания увеличивается: на рис. 3 указано значение времени нарастания фронта с 20 до 80 %. Это время с хорошей точностью совпадает с длительностью исходного импульса, небольшая разница объясняется округлением до ближайшего дискретного значения времени. На рисунке 3 для импульса 100 фс дополнительно показан спектр коэффициента отражения среды в сравнении со спектром мощности исходного импульса. Видно, что из-за узкого спектра входного импульса обрезаются почти все особенности спектра среды. В общем случае не получится создать в выходном импульсе особенности (пики, фронты, спады), длительность которых меньше, чем длительность исходного импульса.

Зависимость от толщины оптической среды. Вычислим такое распределение $n(x)$, которое при отражении будет формировать последовательность 4 импульсов с гауссовой огибающей, для данного примера пусть их длительность (полная ширина на полувысоте) составляет 500 фс. Соответствующая функция $F(t)$ показана на рис. 4а. В качестве входного импульса был использован гауссов импульс длительностью 30 фс, результаты принципиально не изменяются при варьировании этой величины в диапазоне 30–200 фс. Получившаяся в резуль-

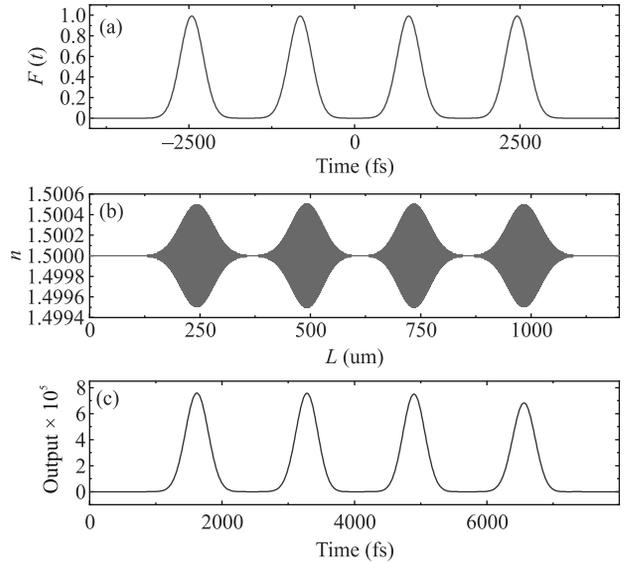


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Заданная функция временного отклика $F(t)$ и соответствующее ей (b) пространственное распределение показателя преломления оптической среды. (с) – Выходная функция временного отклика, получившаяся при отражении от модулированной среды гауссова импульса длительностью 30 фс

тате огибающая выходного импульса (рис. 4а) ожидаемо имеет вид четырех последовательных гауссовых импульсов одинаковой амплитуды, временная задержка между ними соответствует заказанной и равна $\tau = 1630 \pm 1$ фс.

Обратим внимание на профиль показателя преломления $n(x)$. Эта функция имеет 4 максимума в форме гауссиана с набивкой в виде гармонических функций с близкими частотами. Гауссова форма этих максимумов объяснима тем, что преобразование Фурье гауссовой функции дает гауссову функцию. Пространственное расстояние между максимумами равно $\Delta x = 242 \pm 2$ нм.

Каждый из максимумов функции $n(x)$ отвечает за определенный импульс из последовательности, причем более глубокие максимумы отвечают за более поздно приходящие импульсы. Продемонстрируем это: искусственно обрежем оптическую среду, сохранив только первые 3, 2, 1 максимума (рис. 5). Удаление соответствующих максимумов функции модуляции показателя преломления приводит к исчезновению импульсов во временном отклике.

Отметим, что имеет место соотношение $2\Delta x = c\tau$. Таким образом, временная задержка между импульсами на выходе физически получается из того, что импульс отражается с большей глубины оптической среды. Следовательно, максимально возмож-

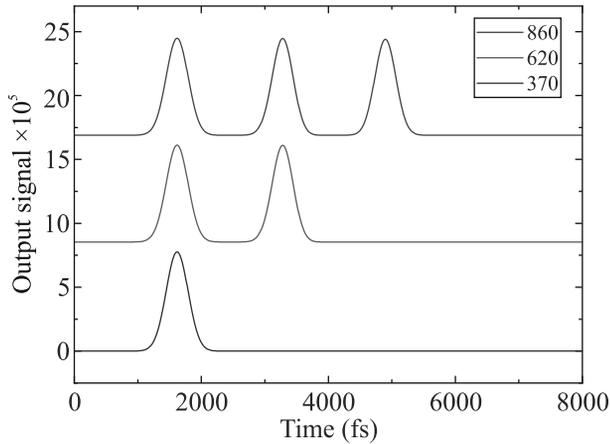


Рис. 5. (Цветной онлайн) Выходные функции временного отклика, получившиеся при отражении от оптической среды, искусственно обрезанной в точках 860, 620, 370 мкм соответственно

ная длина получаемой последовательности импульсов во времени ограничена величиной $T_{\max} = 2L/c$.

Влияние оптического поглощения. В реальных оптических средах присутствует поглощение или рассеяние, которое ухудшает рассматриваемые оптические эффекты. Для оценки влияния оптического поглощения введем мнимую часть показателя преломления: положим $n_0 = 1.5 + 0.0001i$ и повторим расчет. На рисунке 6а показана функция отклика поглощающей среды. Она имеет вид четырех максимумов гауссовой формы, амплитуда которых экспоненциально падает со временем, причем импульсы, которые пришли позже, испытали большее ослабление за счет более длинного пройденного оптического пути.

Для компенсации поглощения предлагается модифицировать задаваемую функцию $F(t)$, искусственно увеличивая амплитуду более поздних компонент. На рисунке 6б показан профиль $n(x)$, построенный для задаваемой функции, в которой амплитуда каждого следующего гауссова импульса в 1.31 раза больше предыдущего. Отраженный от такой среды импульс преобразуется в последовательность (рис. 6с), в которой оптическое поглощение скомпенсировано за счет увеличения коэффициента отражения среды, таким образом, оптический отклик снова соответствует желаемому.

Возможности экспериментальной реализации. Изложенный метод построения модуляции оптической среды для формирования фемтосекундных импульсов может быть реализован в эксперименте при помощи методов изготовления фотонных структур, в которых возможно создавать произвольную

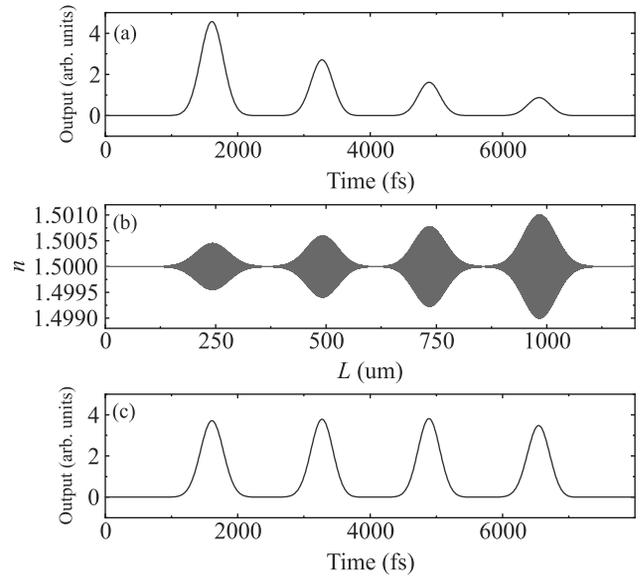


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – выходная функция временного отклика, получившаяся при отражении от оптической среды с поглощением. (б) – Профиль показателя преломления с компенсацией поглощения. (с) – Выходная функция для среды с компенсацией поглощения

непрерывную или квазинепрерывную модуляцию показателя преломления:

- Электрохимическое травление пористого кремния [32], алюминия [33, 34] и титана [35]. Методы позволяют изготавливать оптические среды толщиной до 1 мм, контраст показателя преломления достигает 0.2, среды не имеют поглощения света в материале, однако существенно наличие рассеяния света на порах.
- Двухфотонная лазерная литография [36, 37]. С ее помощью можно создавать среды, имеющие градиентный показатель преломления. Перспективным является метод создания решеток при помощи двухфотонной литографии в окисленном пористом кремнии [38]. Контраст показателя преломления при этом не превосходит 0.05, однако расчеты показывают, что такая величина приемлема. Ограничение на оптическую толщину в этом случае порядка 1 см и определяется, главным образом, стоимостью времени работы установки.
- Брэгговские волокна, созданные прямой лазерной записью [39]. Продольная модуляция показателя преломления достигается облучением сердцевины волокна мощным лазерным излучением [40]. Контраст показателя преломления

не превосходит 10^{-3} – 10^{-4} , однако это может быть компенсировано за счет длины волокна. Линейный размер оптических волокон в рамках этой задачи можно считать неограниченным.

Заключение. В работе теоретически продемонстрирован метод построения оптической среды, способной при отражении формировать фемтосекундный импульс или последовательность импульсов с заданной формой огибающей. Установлены следующие ограничения метода: 1) спектр задаваемой последовательности не должен быть шире спектра импульса, падающего на среду, соответственно временные особенности (максимумы, минимумы, фронты) желаемой последовательности не должны быть короче длительности входного импульса. 2) Общая длина последовательности не может превышать удвоенную оптическую толщину среды, разделенную на скорость света.

Кроме того, было рассмотрено влияние оптического поглощения на работу метода и показана техника, позволяющая скомпенсировать поглощение за счет увеличения коэффициента отражения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 21-72-10103, <https://rscf.ru/project/21-72-10103/>.

1. A. Assion, T. Baumert, M. Bergt, T. Brixner, V. Kiefer, V. Seyfried, M. Strehle, and G. Gerber, *Science* **282**(5390), 919 (1998).
2. B. Kohler, V.V. Yakovlev, J. Che, J.L. Krause, M. Messina, K.R. Wilson, N. Schwentner, R.M. Whitnell, and Y. Yan, *Phys. Rev. Lett.* **74**(17), 3360 (1995).
3. O. Misochko, M. Lebedev, H. Schäfer, and T. Dekorsy, *J. Phys. Condens. Matter* **19**(40), 406220 (2007).
4. C. Sarpe, J. Köhler, T. Winkler, M. Wollenhaupt, and T. Baumert, *New J. Phys.* **14**(7), 075021 (2012).
5. V.V. Lozovoy, X. Zhu, T.C. Gunaratne, D.A. Harris, J.C. Shane, and M. Dantus, *J. Phys. Chem. A* **112**(17), 3789 (2008).
6. P.M. Архипов, М.В. Архипов, А.В. Пахомов, П.А. Образцов, Н.Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **117**(1), 10 (2023).
7. A. M. Weiner, J. P. Heritage, and E. Kirschner, *JOSA B* **5**(8), 1563 (1988).
8. S. T. Cundiff and A. M. Weiner, *Nat. Photonics* **4**(11), 760 (2010).
9. A. M. Weiner, *Opt. Commun.* **284**(15), 3669 (2011).
10. A. M. Weiner, *Rev. Sci. Instrum.* **71**(5), 1929 (2000).
11. O. Martinez, J. Gordon, and R. Fork, *JOSA A* **1**(10), 1003 (1984).
12. A. M. Weiner, D. E. Leaird, J. S. Patel, and J. R. Wullert, *Opt. Lett.* **15**(6), 326 (1990).
13. A. M. Weiner, D. E. Leaird, J. Patel, and J. R. Wullert, *IEEE J. Quantum Electron.* **28**(4), 908 (1992).
14. M. Dugan, J. Tull, and W. Warren, *JOSA B* **14**(9), 2348 (1997).
15. E. Zeek, K. Maginnis, S. Backus, U. Russek, M. Murnane, G. Mourou, H. Kapteyn, and G. Vdovin, *Opt. Lett.* **24**(7), 493 (1999).
16. C. Gu, D. Zhang, Y. Chang, and S.-C. Chen, *Opt. Lett.* **40**(12), 2870 (2015).
17. A. Weiner, *Ultrafast optics*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey (2011).
18. T. Baumert, T. Brixner, V. Seyfried, M. Strehle, and G. Gerber, *Applied Physics B: Lasers & Optics* **65**(6), 779 (1997).
19. T. Brixner, A. Oehrlin, M. Strehle, and G. Gerber, *Appl. Phys. B* **70**, S119 (2000).
20. C. A. Farfan, J. Epstein, and D. B. Turner, *Opt. Lett.* **43**(20), 5166 (2018).
21. S. Boscolo and C. Finot, *Optics & Laser Technology* **131**, 106439 (2020).
22. M. Li and J. Yao, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **23**(20), 1439 (2011).
23. А. А. Архипова, С. А. Журавицкий, Н. Н. Скрябин, И. В. Дьяконов, А. А. Калинин, С. П. Кулик, С. В. Чекалин, Я. В. Карташов, В. Н. Задков, В. О. Компанец, *Письма в ЖЭТФ* **117**(5), 344 (2023).
24. P. Kelly, *Ph. D. thesis*, San Diego State University, San Diego (2019).
25. E. Rahimi and K. Şendur, *JOSA B* **33**(2), A1 (2016).
26. R. U. Tok and K. Şendur, *Phys. Rev. A* **84**(3), 033847 (2011).
27. A. Andreev, A. Balakin, I. Ozheredov, A. Shkurinov, P. Masselin, G. Mouret, and D. Boucher, *Phys. Rev. E* **63**(2), 016602 (2001).
28. A. Yariv and P. Yeh, *Optical waves in crystals*, Wiley, N.Y. (1984), v. 5.
29. A. Luce, A. Mahdavi, F. Marquardt, and H. Wankerl, *JOSA A* **39**(6), 1007 (2022).
30. Т. Крылова, *Интерференционные покрытия*, Машиностроение, Л. (1976).
31. P. Baumeister, *Appl. Opt.* **25**(16), 2644 (1986).
32. S. E. Svyakhovskiy, A. I. Maydykovsky, and T. V. Murzina, *J. Appl. Phys.* **112**(1), 013106 (2012).
33. H. Masuda, M. Ohya, H. Asoh, M. Nakao, M. Nohtomi, and T. Tamamura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**(12A), L1403 (1999).
34. A. Santos, *J. Mater. Chem. C* **5**(23), 5581 (2017).
35. G. A. Ermolaev, S. E. Kushnir, N. A. Sapoletova, and K. S. Napolskii, *Nanomaterials* **9**(4), 651 (2019).

36. X. Zhou, Y. Hou, and J. Lin, *AIP Adv.* **5**(3), 030701 (2015).
37. M. Sharipova, T. Baluyan, K. Abrashitova, G. Kulagin, A. Petrov, A. Chizhov, T. Shatalova, D. Chubich, D. Kolymagin, A. Vitukhnovsky, V.O. Bessonov, and A. A. Fedyanin, *Opt. Mater. Express* **11**(2), 371 (2021).
38. C. R. Ocier, C. A. Richards, D. A. Bacon-Brown et al. (Collaboration), *Light Sci. Appl.* **9**(1), 196 (2020).
39. J. He, B. Xu, X. Xu, C. Liao, and Y. Wang, *Photonic Sens.* **11**, 203 (2021).
40. D. Tosi, *Sensors* **18**(7), 2147 (2018).

Зависимость резонансного обращения волнового фронта света на поляритах от интенсивности оптической накачки в пленках оксида цинка

А. Н. Грузинцев¹⁾

Институт проблем технологии микроэлектроники РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 11 апреля 2023 г.

После переработки 25 мая 2023 г.

Принята к публикации 26 мая 2023 г.

Теоретически и экспериментально показана возможность резонансного обращения волнового фронта света в возбужденной полупроводниковой среде. На эпитаксиальных пленках ZnO при комнатной температуре и накачке азотным лазером обнаружено индуцированное обращение волнового фронта света в инфракрасной области спектра для энергии фотонов, равной половине энергии излучательной рекомбинации поляритонов. Исследованы зависимости интенсивности сигнала обращения волнового фронта от энергии падающего фотона и интенсивности лазерной накачки.

DOI: 10.31857/S1234567823130062, EDN: gawrst

1. Введение. В полупроводниковых материалах существуют для некоторых частот радио и оптического диапазона собственные резонансные колебания (плазмоны, фононы, экситоны и т.д.), приводящие к резонансному колебанию поляризации кристаллической решетки и возникновению особых состояний материала под общим названием – поляритоны. Характер дисперсионных кривых частота–волновой вектор для этих квазичастиц дает высокую локальную плотность состояний в точках с нулевым волновым вектором для резонансных частот. Именно поляритоны обуславливают целый ряд интересных для практического применения свойств полупроводников, таких как комбинационное рассеяние света (КРС), оптическое поглощение, люминесценция и резонансное обращение волнового фронта света. В данной работе мы будем исследовать экситонные состояния в широкозонном материале – оксиде цинка, имеющие резонанс в фиолетовой области спектра 380–400 нм. В этом полупроводнике энергия связи экситона имеет рекордно высокое значение 60 мэВ [1], что позволяет получать высокие плотности данных поляритонов при небольшой интенсивности оптической накачки при комнатной температуре. Для других соединений (например, GaN) требуется создание квантово-размерных структур, чтобы получить высокие плотности экситонов в различных диапазонах спектра. При этом спектральное положение экситонных резонансов можно менять не только химическим соста-

вом, но и геометрическим размером квантовых ям, нитей или точек. Благодаря высокой эффективности излучательной рекомбинации в пленках ZnO в ряде работ наблюдалась стимулированная люминесценция в ультрафиолетовой области 390–400 нм при возбуждении азотным лазером [2, 3]. В этом случае происходило усиление света при излучательной рекомбинации экситонов или электрон-дырочной плазмы (ЭДП) в сильно возбужденном оксиде цинка при мощном лазерном импульсном возбуждении.

Для нас особый интерес вызывает такое нелинейное явление, как обращение волнового фронта (ОВФ) световой волны в возбужденной среде [4–6]. Поскольку в этом случае падающая волна всегда отражается в строго обратном направлении, независимо от угла падения на поверхность образца возникает возможность создания устройств адаптивной оптики для фокусировки обращенной и усиленной волны на подсвеченные объекты. Такая система может самонастраиваться и ОВФ может исправлять искажения, вызванные усиливающей средой или оптическими элементами в лазерном резонаторе. В первых экспериментах [6] по ОВФ использовалось трехволновое смешение в средах с кубической нелинейностью (1) и мощности накачки двух встречных волн порядка 1.6×10^7 Вт/см², а мощность отраженной волны составляла примерно $2 \cdot 10^{-3}$ от мощности третьей сигнальной волны (коэффициент отражения среды). Из-за этого первые зеркала ОВФ имели большой объем, малый коэффициент отражения и были не применимы для довольно миниатюрных по-

¹⁾e-mail: gran@iptm.ru

полупроводниковых лазеров. В работе [7] теоретически и экспериментально показана возможность резонансного ОВФ в возбужденной полупроводниковой среде. На эпитаксиальных пленках ZnO при накачке азотным лазером было обнаружено обращение света для энергии фотонов, равной половине энергии излучательной рекомбинации свободных экситонов. Было предложено объяснение данного эффекта ОВФ: квадратичное взаимодействие световых и экситонных электромагнитных колебаний в возбужденной полупроводниковой среде. Ранее [8] теоретически и экспериментально была показана возможность нерезонансного обращения светового волнового фронта (ОВФ) в возбужденной полупроводниковой среде – на порошке ZnO при комнатной температуре и накачке импульсным азотным лазером. Впервые обнаружено обращение света при ступенчатом временном изменении диэлектрической проницаемости среды во время перехода Мотта. Исследованы зависимости интенсивности сигнала ОВФ от угла его регистрации. Предложено объяснение эффекта: взаимодействие световых и электрон-дырочных плазменных колебаний в полупроводниковой среде во время изменения поляризации полупроводниковой среды под действием мощной оптической накачки.

Интересно подробнее исследовать эффект резонансного ОВФ при интенсивном оптическом возбуждении в пленках оксида цинка в зависимости от интенсивности накачки. При этом происходит процесс всего лишь двухволнового смещения электромагнитных колебаний, вероятность которого довольно велика в нецентросимметричных электрооптических полупроводниковых материалах типа оксида цинка. В этом случае при комнатной температуре происходит ОВФ на поляритонной волне с нулевым волновым вектором, обусловленной образованием свободных экситонов или рекомбинацией ЭДП в тонком слое порядка 100 нм. Целью данной работы является исследование эффектов резонансного обращения волнового фронта света на поляритонах разного типа в пленках ZnO в зависимости от энергии фотона падающего света, типа поляритона и от интенсивности возбуждающего ультрафиолетового лазера.

2. Теория. Выражение для поляризации \mathbf{P} полупроводниковой среды при воздействии электромагнитных колебаний E_1 и E_2 с двумя разными частотами Ω и ω можно записать в тензорном виде [7]:

$$P_i = \chi_{ij}^1 E_j + \chi_{ijk}^2 E_j E_k + \chi_{ijkl}^3 E_j E_k E_l + \dots, \quad (1)$$

где суммирование в правой части идет по всем одинаковым индексам ($j, k, l = 1, 2, 3$) или трем составляющим суммарного электрического поля, а χ_1, χ_2 и

χ_3 – линейная, квадратичная и кубическая оптическая восприимчивость среды, представляющая в общем случае тензора второго, третьего и четвертого рангов, соответственно. Остановимся в (1) более подробно на члене с квадратичной оптической восприимчивостью, характерном для кристаллов с отсутствием центра симметрии в кристаллической решетке и ответственным за генерацию второй гармоники и электрооптической эффект в материале (имеющим в ZnO с решеткой гексагонального вюрцита значительную величину [7]). Для упрощения выкладок положим, что вектор поляризации \mathbf{P} и оба электрических поля E_1 и E_2 направлены вдоль оси роста кристалла, совпадающей с осью Z пространства. Световая волна движется в направлении оси X и имеет вид: $E_2 = \{E_{20} \exp(-i\omega t + ikx) + E_{20}^* \exp(i\omega t - ikx)\}$. При этом второе электромагнитное колебание в полупроводнике соответствует на кривой дисперсии поляритона точке экситона в состоянии покоя (волновой вектор $K = 0$) и имеет вид: $E_1 = \{E_{10} \exp(-i\Omega t) + E_{10}^* \exp(i\Omega t)\}$. Тогда второй член в уравнении (1) будет иметь вид:

$$\chi^2 (E_1 + E_2)(E_1 + E_2) = 2\chi^2 E_1 E_2 + \chi^2 E_1^2 + \chi^2 E_2^2. \quad (2)$$

Остановимся подробнее на первом слагаемом в правой части (2) и распишем его в предположении, что частота световой волны равна половине экситонной частоты, т.е. $\omega = \Omega/2$.

$$2\chi^2 E_1 E_2 = 2\chi^2 \{E_{10} E_{20} \exp(-i3\omega t + ikx) + E_{10} E_{20}^* \exp(-i\omega t - ikx) + \text{К.С.}\}, \quad (3)$$

где К.С. обозначает комплексно сопряженные члены к первым двум слагаемым в (3). Выражение (3) для поляризации полупроводника дает две электромагнитных волны, но первая из них не укладывается на кривую дисперсию кристалла. Тогда как вторая представляет собой обращенную световую волну, движущуюся навстречу падающей – E_2 не зависимо от угла падения света на поверхность полупроводника. Ее интенсивность пропорциональна интенсивности падающей волны, интенсивности экситонных колебаний и квадратичной нелинейной оптической восприимчивости среды. Если возбуждать экситоны ультрафиолетовым азотным импульсным лазером в ZnO, глубина поглощения которого составляет порядка 0.1–0.2 мкм, то легко получить условия больших интенсивностей накачки для ОВФ в тонком приповерхностном слое полупроводника.

Выше мы рассматривали второй квадратичный по полю член в выражении для поляризации среды (1), но поляритон характерен тем, что дает изменение поляризации и в первом линейном члене за

счет резонансной раскачки поляризуемости χ^1 в экситонной области (или за счет изменения населенности электронных уровней в полупроводнике). При этом временная зависимость поляризуемости имеет вид: $\chi^1 = \chi^{10} + \{\chi^{11} \exp(-i\Omega t) + \chi^{11*} \exp(i\Omega t)\}$, где χ^{10} – постоянная величина. Остановимся подробнее на первом слагаемом в правой части (1) и распишем его в предположении, что частота световой волны E_2 равна половине экситонной частоты, т.е. $\omega = \Omega/2$.

$$\chi^1 E_2 = \chi^{10} E_2 + \{\chi^{11} E_{20} \exp(-i3\omega t + ikx) + \chi^{11} E_{20}^* \exp(-i\omega t - ikx) + \text{К.С.}\}. \quad (4)$$

Выражение (4) для поляризации полупроводника уже дает три электромагнитных волны, но вторая из них не укладывается на кривую дисперсию кристалла. Тогда как третья представляет собой обращенную световую волну, движущуюся на встречу падающей – E_2 не зависимо от угла падения света на поверхность полупроводника. Ее интенсивность пропорциональна интенсивности падающей волны и влиянию поляритонных колебаний на линейную оптическую восприимчивость среды. В этом случае имеем аналог КРС [9] на собственных колебаниях – поляритонах среды. Тогда как в случае квадратичной поляризуемости (3) обращение волнового фронта является аналогом параметрической генерации света (ПГС). Можно предположить, что второй механизм резонансного ОВФ – аналог КРС (4) дает большую интенсивность обращенного света, особенно, для материалов с центром симметрии в кристаллической решетке. Но даже ОВФ на квадратичной поляризуемости больше по интенсивности обычной ПГС из-за наличия 100 % фазового синхронизма обращенной волны для любого материала и из-за большой плотности локальных состояний фотонов для поляритонной волны.

3. Эксперимент. В работе использовались пленки ZnO, нанесенные на сапфир основной ориентации (0001) методом электронно-лучевого высоковакуумного напыления на установке L-560 (Leubold Haerueus). Толщина пленок составляла 0.5 мкм. Пленки ZnO имели высокое кристаллическое качество с осью роста, перпендикулярной поверхности [7]. В спектре их люминесценции при комнатной температуре превалировал пик экситонного свечения с максимумом 3.22 эВ. Спектры фотолюминесценции (ФЛ) пленок исследовались при возбуждении импульсным азотным лазером ЛГИ-505 с длительностью импульса 10 нс, пиковой мощностью 15 кВт и длиной волны 337.1 нм. Схема установки, использованной для измерения сигнала обращения волново-

го фронта и ФЛ на пленках оксида цинка подробно описана в работах [7, 8]. Здесь важно отметить, что падающая на образец световая волна была от лампы накаливания “Нарва-100”, запитанной источником постоянного тока, и падала на образец под углом более 45 градусов, чтобы геометрически отраженный свет не попадал в регистрирующий монохроматор МДР-6. Свет лампы накаливания после прохождения через светосильный монохроматор МДР-12 был непрерывным во времени и имел спектральную полуширину не хуже 4 нм. Система регистрации спектра была настроена на частоту возбуждающего лазера ЛГИ-505 и состояла из усилителя переменных сигналов “Унирап-237” с выходом на компьютер. Образец оксида цинка находился при комнатной температуре и был сориентирован так, чтобы электромагнитные колебания лазерной и световой волны имели составляющие вдоль оси роста пленки. Лазерный луч фокусировался на поверхности пленки в пятно диаметром менее 100 мкм, что позволяло получать максимальную плотность мощности накачки порядка 10^8 Вт/см². Совмещение светового и лазерного пятна на образце контролировалось с помощью оптического микроскопа. В качестве расщепителя света использовалась обычная кварцевая пластина. При регистрации спектров обращенного сигнала и люминесценции пленки использовались светофильтры ЖС-12 и СЗС-23 соответственно, для удаления паразитных сигналов второго порядка двойного монохроматора МДР-6 в регистрируемых спектрах.

4. Результаты и их обсуждение. На рисунке 1 показаны спектры сигнала обращения волнового фронта образцов ZnO в красной области спектра при мощности импульсной оптической накачки азотного лазера 70 кВт/см² и для разной энергии фотонов падающего непрерывного света от 1.75 эВ (рис. 1, кривая 1) до 1.42 эВ (рис. 1, кривая 2). В этом случае перед регистрирующим монохроматором МДР-6 ставился инфракрасный (ИК) светофильтр КС-15, который не пропускал не только рассеянный свет лазера 337.1 нм, но и сигнал люминесценции пленки ZnO. Это делалось для зарезания возможного в монохроматоре второго порядка линии люминесценции. Мы видим, что при световой подсветке с энергией фотона 1.75 эВ (рис. 1, кривая 1) в красной области спектра отсутствует какой-либо обращенный сигнал. Однако при приближении энергии фотона к половине экситонной $3.22/2 = 1.61$ эВ появляется узкий пик обращенной световой волны, энергетическое положение которого совпадает с энергией падающих на образец фотонов. Метод регистрации сигнала говорит также о том, что он, в отличие от падающей волны, име-

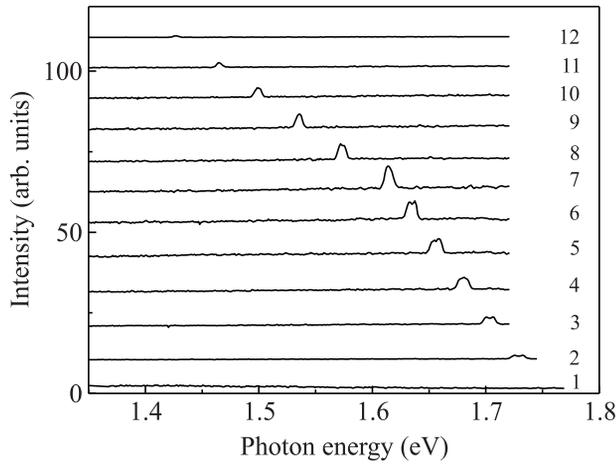


Рис. 1. Спектры сигнала обращения волнового фронта пленки ZnO в красной области спектра при энергии фотонов падающего света, эВ: 1 – 1.75, 2 – 1.72, 3 – 1.70, 4 – 1.67, 5 – 1.65, 6 – 1.63, 7 – 1.61, 8 – 1.57, 9 – 1.53, 10 – 1.49, 11 – 1.46 и 12 – 1.42. Интенсивность возбуждающего азотного лазера: 70 кВт/см². T = 300 K

ет импульсный характер с частотой возбуждающего лазера. Спектральная полуширина сигнала ОВФ совпадает с шириной падающей световой волны, а интенсивность обращенной волны зависит от ее спектрального положения.

На рисунке 2 представлены спектры ФЛ пленок при различных интенсивностях возбуждающего азотного лазера. Видно, что при малых плотностях мощности возбуждения 70 кВт/см² (кривая 1) в ФЛ пленок ZnO преобладает полоса свободных экситонов, максимум которой незначительно сдвигается в длинноволновую сторону от 3.22 эВ с увеличением мощности накачки на три порядка величины. Характер зависимости площади под кривой свечения и ширины экситонной линии люминесценции на полувысоте от интенсивности лазерного возбуждения свидетельствуют о ее спонтанном характере. Далее с мощности накачки более 22 МВт/см² (кривая 2) в спектре ФЛ появляется линия стимулированной люминесценции с максимумом 3.18 эВ (так называемая P-полоса), обусловленная рассеянием двух свободных электронов с излучением одного из них [10]. В случае стимулированной люминесценции рост площади был сверхлинейным с явно выраженным пороговым значением, а ширина линии, наоборот, уменьшалась для надпороговых плотностей мощности. При интенсивностях возбуждения 70 МВт/см² (рис. 2, кривая 3) в люминесценции появляется N-пик с максимумом 3.12 эВ, связанный со стимулированной рекомбинацией ЭДП оксида цинка. Теперь одновременно с импульсным возбуждением азотным лазером на-

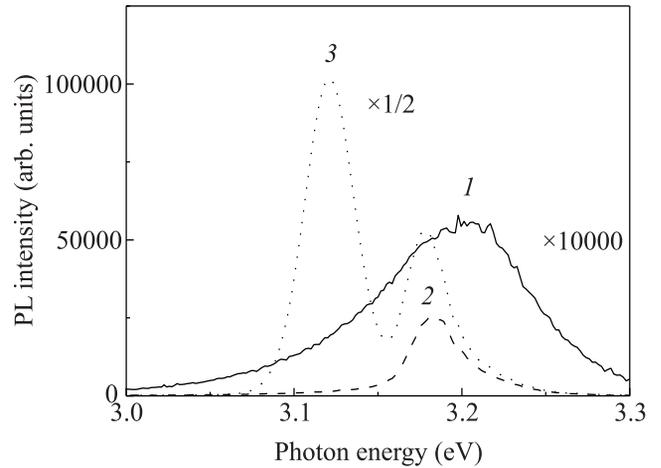


Рис. 2. Спектры ФЛ пленок ZnO при различных интенсивностях возбуждающего азотного лазера: 70 кВт/см² (1); 22 МВт/см² (2) и 70 МВт/см² (3). T = 300 K

правим на образец непрерывный по времени световой поток из инфракрасной спектральной области с фиксированной энергией фотона от 1.5 до 1.7 эВ, равной половине энергии излучательной рекомбинации ЭДП или экситона в оксиде цинка. В момент лазерного импульса возникает обращение волнового фронта непрерывной подсветки на поляритонных колебаниях пленки (рис. 3). Мы видим, что при разной

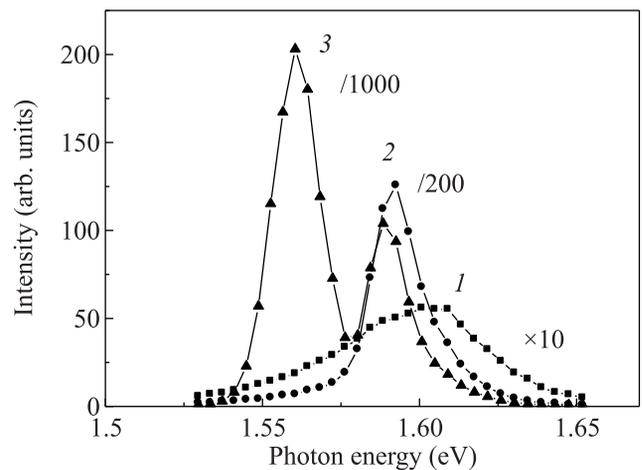


Рис. 3. Интенсивность максимума сигнала ОВФ пленок ZnO в зависимости от энергии фотона падающего света для различной мощности возбуждающего азотного лазера: 70 кВт/см² (1); 22 МВт/см² (2) и 70 МВт/см² (3). T = 300 K

мощности азотного лазера обращенный световой сигнал, повторяющий спектр падающего непрерывного света, присутствует не для всех ИК длин волн. Однако, при приближении энергии фотона к 1.61 эВ,

равной половине энергии рекомбинации экситона, интенсивность обращенной волны резко возрастает. Метод регистрации сигнала говорит о том, что в отличие от падающей волны обращенная имеет импульсный характер с частотой возбуждающего лазера. Спектральная полуширина сигнала ОВФ совпадает с шириной падающей световой волны, а интенсивность волны зависит от ее спектрального положения и мощности возбуждающего азотного лазера. На рисунке 3 построены зависимости интенсивности обращенной волны в максимуме от его спектрального положения. Видно, что, как и на рис. 1, сигнал ОВФ имеет максимальную интенсивность при энергии падающих фотонов 1.61 эВ, почти совпадающей с половиной энергии экситонного пика ФЛ для минимальных мощностей азотного лазера 70 кВт/см². Причем, на кривой 2 рис. 3 положение максимума сигнала ОВФ находится уже при энергии 1.59 эВ, равной половине энергии *P*-полосы в спектрах люминесценции для тех же мощностей оптического возбуждения лазера 22 МВт/см². Для максимальной мощности азотного лазера 70 МВт/см² (рис. 3, кривая 3) характерно появление второго пика ОВФ в длинноволновой области с энергией фотона 1.56 эВ, аналогичное появлению пика рекомбинации ЭДП с энергией 3.12 эВ на кривой ФЛ (рис. 2, кривая 3). На рисунке 3 построены зависимости интенсивности обращенной волны в максимуме ее спектрального положения для разных мощностей азотного лазера. Видно, что сигнал ОВФ имеет три максимума интенсивности с энергией фотонов 1.61, 1.59 и 1.56 эВ для мощности лазера 70 кВт/см², 22 МВт/см² и 70 МВт/см² (рис. 3, кривые 1, 2 и 3, соответственно) при энергии падающих фотонов, совпадающей с половиной энергии пиков рекомбинации одиночных экситонов, рассеянных экситонов и ЭДП в оксиде цинка. Именно рекомбинация данного типа поляритонов превалирует в спектрах ФЛ пленок оксида цинка для данных мощностей азотного лазера (рис. 2).

В нашем случае происходит резонансное ОВФ на электро-магнитных колебаниях взаимодействующих экситонов и ЭДП, обладающих нулевым волновым вектором. Отметим, что согласно приведенным в [7] теоретическим выкладкам для сред с квадратичной оптической нелинейностью может возникать резонансное обращение волнового фронта при энергии фотонов падающего света, равной половине энергии электро-магнитных колебаний-поляритонов в среде с нулевым волновым вектором (экситоны, плазмоны, фононы или примесные состояния). При этом, интенсивность резонансной обращенной волны пропорциональна интенсивности падающего света и ин-

тенсивности стоячей волны электро-магнитных колебаний поляритонов (3). Интересно отметить, что для случая оксида цинка, в процессе образования ЭДП, имеется также сигнал ОВФ света в нерезонансных видимой и ИК областях спектра [8]. При этом интенсивность сигнала нерезонансного обращения волнового фронта на порядок меньше интенсивности резонансного ОВФ и увеличивается с увеличением длины волны падающего непрерывного света в ИК спектральную область.

Остановимся подробнее на зависимости сигнала резонансного ОВФ с энергией фотона в максимуме 1.61, 1.59 и 1.56 эВ от мощности накачки импульсного азотного лазера (рис. 4). Использование калибро-

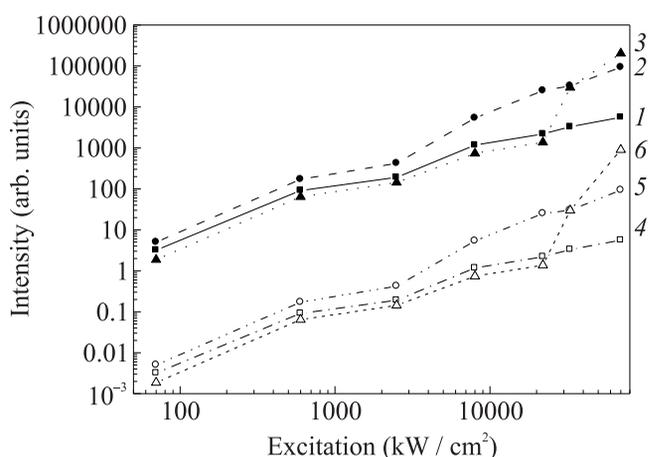


Рис. 4. Зависимость интенсивности сигнала ФЛ в максимуме 3.22 эВ (1); 3.18 эВ (2) и 3.12 эВ (3), а также сигнала модулированного ОВФ пленок ZnO для энергии фотона отраженного света: 1.61 эВ (4); 1.59 эВ (5) и 1.56 эВ (6) от интенсивности возбуждающего азотного лазера. $T = 300$ К

ванных поглотителей света позволило нам получить набор мощностей от 0.070 МВт/см² до 70 МВт/см² ультрафиолетового (УФ) возбуждения пленок ZnO. Видно, что интенсивность сигнала обращения волнового фронта с энергией фотона 1.61 эВ (рис. 4, кривая 4) растет почти линейно с интенсивностью УФ накачки во всем диапазоне измерений аналогично росту люминесценции свободных экситонов с энергией фотона 3.22 эВ (рис. 4, кривая 1). Максимум ОВФ с энергией фотонов 1.59 эВ показывает нелинейный рост интенсивности (рис. 4, кривая 5) для накачки выше 2500 кВт/см² аналогично росту ФЛ рассеянных экситонов с максимумом 3.18 эВ (рис. 4, кривая 2). Рост же сигнала ОВФ с максимумом 1.56 эВ (рис. 4, кривая 6) начинается с больших мощностей накачки 22 МВт/см² аналогично росту ФЛ ЭДП с

максимумом 3.12 эВ (рис. 4, кривая 3). При столь высокой интенсивности накачки происходит переход Мотта в газе свободных экситонов с образованием множества свободных носителей заряда электронов и дырок (ЭДП), что видно по трансформации спектров свечения пленок (рис. 2).

Отметим, что согласно выше приведенным теоретическим выкладкам для сред с квадратичной оптической нелинейностью может возникать обращение волнового фронта при энергии фотонов падающего света, равной половине энергии поляритонных колебаний (3)–(4). При этом интенсивность обращенной волны пропорциональна интенсивности падающего света и интенсивности поляритонной волны. В нашем случае, интенсивность падающего красного света практически постоянна в исследованном спектральном диапазоне 1.4–1.7 эВ. Поэтому спектральная кривая интенсивности сигнала ОВФ повторяет кривую экситонной или ЭДП интенсивности (рис. 2, кривые 1–3, соответственно), а сам процесс происходит лишь в момент большой плотности экситонов в полупроводнике. Поскольку время излучательной рекомбинации экситонов в пленках ZnO при комнатной температуре составляет порядка пикосекунд, то экситонные колебания существуют лишь в момент действия лазерного импульса накачки. Следовательно, ОВФ носит также импульсный характер, что подтверждается регистрацией переменного сигнала на частоте лазера в наших исследованиях. Ввиду ярко выраженной спектральной зависимости интенсивности пика обращенного сигнала (рис. 3) обнаруженный нами процесс не может быть рассеянием непрерывного света на поликристаллических зернах пленки ZnO, а сигнал чисто геометрического отражения света от поверхности образца не попадал в регистрирующую систему.

Схематически возможные процессы излучательной рекомбинации поляритонов возбужденной среды между уровнями электрона $|1\rangle$ и $|0\rangle$ представлены на рис. 5. При этом по оси X показано изменение волнового вектора фотона или электрона, а по оси Y – изменение энергии. На рисунке 5а изображена стимулированная ФЛ с испусканием одного фотона и фонона, необходимого для выполнения закона сохранения импульса. Поскольку энергия фонона довольно мала, то излучается фотон с энергией $h\Omega$, почти равной энергии электронного перехода (экситона или ЭДП, в нашем случае). Однако, аналогично двухфотонному поглощению в среде может происходить и двухфотонная стимулированная ФЛ с участием виртуального уровня энергии, расположенного между уровнями электрона $|1\rangle$ и $|0\rangle$ (рис. 5б). Если энер-

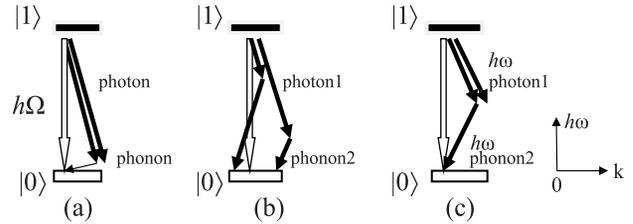


Рис. 5. Схема электронных переходов между энергетическими уровнями $|1\rangle$ и $|0\rangle$ поляритонов возбужденной среды с излучением фотонов в процессе обычной стимулированной ФЛ (а), двухфотонной нерезонансной ФЛ (б) и двухфотонной резонансной ФЛ (с)

гии двух фотонов не равны, то сохранение волнового вектора не происходит и требуется еще дополнительное излучение фонона. Другое дело при резонансном двухфотонном процессе (рис. 5с), когда энергии двух излученных фотонов равны $h\omega = h/2$ и их волновые векторы противоположны. Тогда уже не требуется дополнительный фонон для сохранения импульса и имеем всего лишь двухчастичный процесс с гораздо большей вероятностью. Видно возникновение при этом, кроме фотона, аналогичного стимулирующему, еще и обращенного фотона с половиной энергии перехода (поляритона), что описано формулой (4). Возбужденная среда подразумевает колебание поляризуемости в линейном члене с частотой Ω поляритона (экситонов или ЭДП), превалирующего при данной интенсивности накачки.

5. Заключение. Таким образом, теоретически предсказан (3)–(4) и экспериментально исследован процесс обращения волнового фронта световой волны, падающей на поверхность сильно возбужденной азотным лазером пленки ZnO. Показано, что ОВФ происходит при энергиях падающих фотонов, равных половине энергии излучательной рекомбинации превалирующих поляритонов (экситонов или ЭДП). Следовательно, можно сказать, что в данном случае обращение волнового фронта происходит на экситонных или ЭДП состояниях полупроводниковой пленки, превалирующих для данной интенсивности возбуждения. Если учесть, что лазерное излучение при зона-зонном возбуждении поглощается в субмикронном (0.1 мкм) поверхностном слое [8], то легко получить высокую плотность экситонов при накачке полупроводника импульсным азотным лазером. При этом, для обращения света возможно использование именно тонких пленок ZnO, обладающих высоким кристаллическим и люминесцентным качеством. В нашем случае из-за большой энергии связи экситона практически вся энергия лазерной накачки переходила в экситонные или ЭДП колебания оксида цин-

ка, на которых и происходит процесс ОВФ. Для процесса резонансного ОВФ необходимо наличие каких-либо поляритонных колебаний в оптически возбужденной среде и интенсивность обращенного сигнала пропорциональна интенсивности рекомбинации этих поляритонов (рис. 4), что согласуется с теоретическими формулами (3)–(4). При этом интенсивность обращенной волны может быть выше падающей из-за перекачки энергии от рекомбинирующих поляритонов.

Обнаруженный нами механизм ОВФ в полупроводниковой среде существенно отличается от процесса четырехволнового смешения на встречных пучках в оптически нелинейной среде [11–15]. Там также происходит ОВФ сигнальной волны, но среда должна быть прозрачной для всех пучков света и обладать кубической оптической нелинейностью. Из-за малой величины кубической оптической восприимчивости эффективность обращения света невысока и требуется большой объем нелинейной среды. В нашем случае имеют место механизмы ОВФ на квадратичной (3) [16–18] или даже линейной (4) [19, 20] оптической поляризации полупроводника, которые по определению выше кубической. Для проверки участия линейной поляризуемости (4) в нашем эффекте мы использовали падающий ИК свет, поляризованный только перпендикулярно оси роста пленок. Тем самым исключалось влияние квадратичной поляризуемости (3) оксида цинка. При этом интенсивность сигнала ОВФ падала лишь в полтора раза, что говорит о существенном вкладе линейной поляризуемости и наличии КРС на поляритонных колебаниях (4). Ранее [21] мы наблюдали также нерезонансное ОВФ в пленках ZnO в широком диапазоне спектра от видимых до ИК волн. Этот эффект был на порядок меньше резонансного ОВФ и связан с изменением показателя преломления света на индуцированных лазером свободных носителях заряда в полупроводниковой среде.

Автор выражает благодарность В. Т. Волкову за предоставление пленок оксида цинка.

Работа выполнена в рамках государственного задания # 075-01304-23-00.

1. Y. Chen, D. M. Bagnall, Z. Zhu, T. Sekiuchi, and K. Park, *J. Cryst. Growth* **181**, 165 (1997).
2. J. Chen and T. Fujita, *Jpn. J. Appl. Phys.* **41**, L203 (2002).
3. А. Н. Грузинцев, В. Т. Волков, Л. Бартхоу, П. Беналул, *ФТП* **36**(6), 741 (2002).
4. P. A. Belanger, A. Hardy, and A. E. Seigman, *Appl. Optic* **19**, 602 (1980).
5. J. F. Lam and W. P. Brown, *Opt. Lett.* **5**, 61 (1980).
6. D. M. Bloom and G. C. Bjoklund, *Appl. Phys. Lett.* **31**, 592 (1977).
7. А. Н. Грузинцев, В. Т. Волков, *ФТП* **38**, 543 (2004).
8. А. Н. Грузинцев, *ФТП* **43**, 289 (2009).
9. Ф. Качмарек, *Введение в физику лазеров*, Мир, М. (1981), с. 256.
10. Y. G. Wang, N. Ohashi, Y. Wada, I. Sakaguchi, T. Ohgaki, and H. Haneda, *J. Appl. Phys.* **100**, 023524 (2006).
11. H. N. Eichler and O. Mehl, *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **10**, 43 (2001).
12. I. M. Vellekoop, M. Cui, and C. Yang, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 081108 (2012).
13. A. Y. Okulov, *J. Phys. B* **41**, 101001 (2008).
14. G. S. He, *Prog. Quantum Electron.* **26**, 131 (2002).
15. P. V. Polyanskii and K. V. Felde, *Opt. Spectrosc* **98**, 913 (2005).
16. M. Y. Lanzerotti, A. L. Gaeta, and R. W. Boyd, *Phys. Rev. A* **51**, 3182 (1995).
17. M. Jang, C. Yang, and I. M. Vellekoop, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 093902 (2017).
18. C. Li, *Infrared and Laser Engineering* **48**, 0702001 (2019).
19. D. M. Pepper and A. Yariv, *Opt. Lett.* **5**, 59 (1980).
20. M. R. Belic, D. Timitievich, and W. Krolikowski, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 1723 (1991).
21. А. Н. Грузинцев, *ФТП* **54**, 700 (2020).

Слабая локализация света в магнитоактивной среде

Е. Е. Городничев⁺¹⁾, Д. Б. Рогозкин^{+*}

⁺Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

^{*}Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Духова (ВНИИА), 127055 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2023 г.

После переработки 28 мая 2023 г.

Принята к публикации 28 мая 2023 г.

Вычислен интерференционный вклад в оптический кондактанс (полное пропускание) образца неупорядоченной фарадеевской среды. Показано, что причиной подавления интерференции волн в магнитном поле являются акты рассеяния с переворотом спиральности. Магнитное поле не разрушает интерференцию волн с заданной спиральностью, но подавляет ее, если спиральность на различных участках траектории меняется. Это приводит к уменьшению интерференционного вклада в кондактанс с ростом магнитного поля. Аналогичное явление – отрицательное магнетосопротивление – известно как следствие слабой локализации электронов в металлах с примесями. Обнаружено, что с ростом магнитного поля изменение интерференционной поправки к оптическому кондактансу стремится к некоторому предельному значению, зависящему от отношения транспортной длины свободного пробега к длине рассеяния с переворотом спиральности. Обсуждается возможность управления с помощью поля переходом к режиму сильной “андерсоновской” локализации в квазиодномерном случае.

DOI: 10.31857/S1234567823130074, EDN: gbfzgg

1. Поиск оптических аналогов квантовых эффектов, наблюдаемых при транспорте электронов в твердотельных структурах, привлекает внимание на протяжении более тридцати лет [1–3]. Полученные в этом направлении результаты открывают новые возможности для манипуляции когерентными световыми полями [3] и важны для многих приложений, например, для создания элементов оптических устройств (фотопреобразователей [4], сенсоров, спектрометров [5, 6], случайных лазеров [7] и др.). В качестве примеров, иллюстрирующих аналогию между оптическими и квантовыми электронными явлениями, можно указать андерсоновскую локализацию света в случайных слоистых структурах [8, 9], оптические таммовские состояния в фотонных кристаллах [10], универсальные флуктуации оптического кондактанса [11, 12], фотонный аналог эффекта Ааронова–Бома [13, 14].

Хотя оптический кондактанс обсуждался в ряде теоретических и экспериментальных работ (см. [11, 12, 15]) в контексте изучения его флуктуаций в Q1D-системах (волноводах), вклад эффекта слабой локализации электромагнитных волн в кондактанс до сих пор не изучен. В отличие от электронов, для которых известны различные способы манипуляции интерференционным вкладом в кондактанс [16–18],

применительно к оптическому кондактансу этот вопрос не рассматривался. Эффект слабой локализации света обсуждался только в дифференциальном по углам коэффициенте отражения, где он проявляется как когерентное усиление обратного рассеяния (см., например, [2, 19, 20] и ссылки в них).

Эффект слабой локализации в металлах с примесями есть, как известно [2, 16–18], вследствие интерференции электронных волн, проходящих по обращенным во времени траекториям. Он проявляется, в частности, в виде отрицательного магнетосопротивления [2, 16–18] – уменьшения отрицательной интерференционной поправки к кондактансу с ростом магнитного поля. Случайный сдвиг фаз между интерферирующими электронными волнами в этом случае обусловлен эффектом Ааронова–Бома [2, 16]. Для световых волн, для которых влияние магнитного поля на интерференцию обусловлено эффектом Фарадея, ситуация иная. В отличие от электронов, магнитное поле вообще не приводит к разрушению интерференции волн, если их спиральность не меняется [21–23]. Механизм разрушения интерференции включается только из-за процесса деполяризации – рассеяния с переворотом спиральности. При интерференции волн с одинаковой спиральностью обусловленные магнитным полем фазовые сдвиги складываются, а с противоположной – сокращаются. Возникающий при многократном рассеянии случайный

¹⁾e-mail: gorodn@theor.mephi.ru

сдвиг фаз между волнами с одинаковой спиральностью приводит к подавлению интерференции.

В настоящей работе вычислена интерференционная поправка к оптическому контактансу неупорядоченного образца фарадеевской среды. Расчеты проведены на основе системы уравнений диффузии для двух куперонных мод, описывающих интерференцию обращенных во времени волн с заданной спиральностью. Показано, что, как и в случае отрицательного магнетосопротивления металлов с примесями, с ростом магнитного поля интерференционный вклад в оптический контактанс уменьшается. В пределе сильного магнитного поля возникает эффект “насыщения” – интерференционный вклад в оптический контактанс достигает предельной величины, которая не зависит от напряженности поля и определяется отношением транспортной длины упругого рассеяния к длине затухания циркулярной поляризации. В случае волновода (Q1D геометрии) интерференционный вклад оказывается обратно пропорциональным напряженности поля и длине образца L . Это позволяет сделать вывод о критическом значении поля, препятствующем переходу к режиму сильной андерсоновской локализации с ростом L .

2. Рассмотрим прохождение электромагнитных волн через образец магнитоактивной среды с рассеивающими центрами. Предполагается, что его линейные размеры L_x, L_y, L значительно превышают транспортную длину упругого рассеяния, $L_x, L_y, L \gg l_{tr}$, и выполнено условие слабой локализации, $k_0 l_{tr} \gg 1$ (k_0 – волновое число). Число поперечных мод \mathcal{N} , в которых происходит распространение электромагнитных волн через образец, велико, $\mathcal{N} = k_0^2 \mathcal{A} / (4\pi) \gg 1$ ($\mathcal{A} = L_x L_y$ – площадь поперечного сечения образца) [12].

Согласно [2, 3, 15], контактанс (полное пропускание) образца есть сумма коэффициентов прохождения T_{ab} , связывающих входные и выходные моды a и b , соответственно,

$$T = \sum_{a,b} T_{ba}. \quad (1)$$

В первом приближении по $1/(k_0 l_{tr})$ усредненный по расположению рассеивателей контактанс $\langle T \rangle$ определяется лестничными диаграммами и равен [2, 3, 11]

$$\langle T \rangle = 2\mathcal{N}l_{tr}/L. \quad (2)$$

Множитель 2 в $\langle T \rangle$ учитывает две независимые поляризации волн, ортогональные линейные или две круговые по и против часовой стрелки. Интерференционный вклад $\langle \delta T \rangle$ в контактанс описывается

диаграммой, содержащей одну вершину Хиками (см. рис. 1 и [2, 16–18]). Входящая в диаграмму средняя

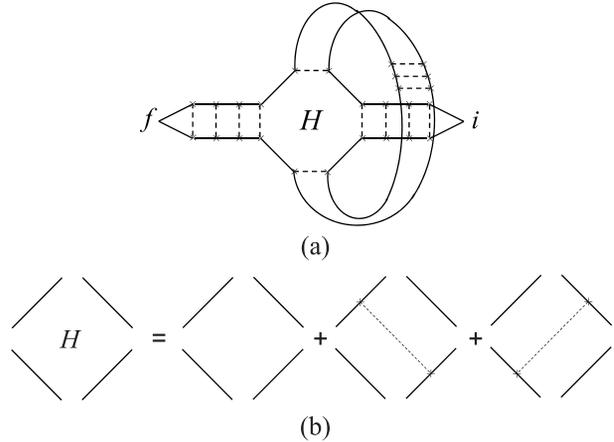


Рис. 1. (а) – Интерференционный вклад в контактанс. (б) – Вершина Хиками [2]. Сплошные линии соответствуют средним функциям Грина в среде. Пунктирные линии обозначают рассеяние на неоднородностях среды. Входящий i и выходящий f лестничные пропагаторы содержат суммирование по модам

функция Грина $\langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | \mathbf{h}) \rangle$ описывает распространение электромагнитных волн в магнито-активной среде между актами рассеяния и определяется выражением [22–26]

$$\langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | \mathbf{h}) \rangle = \langle G_{scal}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rangle \times \left[P_{ik}^{(+)}(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{h}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/2} + P_{ik}^{(-)}(\mathbf{n}) e^{i\mathbf{h}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/2} \right], \quad (3)$$

где $\langle G_{scal}(|\mathbf{r}|) \rangle$ – скалярная функция Грина [2], $\mathbf{n} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ и

$$P_{ik}^{(\pm)}(\mathbf{n}) = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{ik} - n_i n_k \pm i e_{ikj} n_j) \quad (4)$$

– проекционные операторы на состояния поля с определенной спиральностью (e_{ikj} – антисимметричный тензор). Вектор \mathbf{h} в (3) пропорционален напряженности приложенного магнитного поля \mathbf{H} , $\mathbf{h} = 2V\mathbf{H}$ (V – постоянная Верде [27]).

При вычислении изображенной на рис. 1 диаграммы будем предполагать, что магнитное поле достаточно слабое, $hl \ll 1$ (l – длина свободного пробега, $l/l_{tr} = 1 - \langle \cos \vartheta \rangle$, $\langle \cos \vartheta \rangle$ – средний косинус угла однократного рассеяния), и набег фазы, обусловленный полем, происходит в результате многих актов рассеяния. В этом приближении можно пренебречь влиянием магнитного поля на амплитуду однократного рассеяния и не учитывать поле при вычислении вершины Хиками (см. рис. 1b). Диаграмму на рис. 1

можно вычислить, “перезамыкая” входящие пропагаторы в формуле для корреляционной функции флуктуаций интенсивности поляризованного света, полученной в [28, 29]. Возникающий в результате “внутренний” пропагатор (см. “петлю” на рис. 1а) описывает интерференцию волн, распространяющихся по обращенным во времени траекториям. Он определяется суммой максимально перекрестных диаграмм – купероном $\hat{C} = \langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\mathbf{h}) G_{jl}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1|\mathbf{h}) \rangle_C$. С помощью равенства $G_{jl}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1|\mathbf{h}) = G_{lj}^*(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1|-\mathbf{h})$ куперон можно свести к сумме лестничных диаграмм, в которых в одной из функций Грина переставлены поляризационные индексы и координаты, и направление магнитного поля заменено на противоположное (см. рис. 2 и [25, 26]),

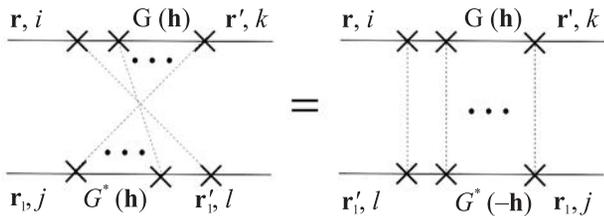


Рис. 2. Преобразование максимально перекрестных диаграмм к лестничным

$$\begin{aligned} & \langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\mathbf{h}) G_{jl}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1|\mathbf{h}) \rangle_C = \\ & = \langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\mathbf{h}) G_{lj}^*(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1|-\mathbf{h}) \rangle_C. \end{aligned} \quad (5)$$

В случае $L \gg l_{tr}$ при вычислении входящих и выходящих лестничных пропагаторов в диаграмме, показанной на рис. 1а, можно воспользоваться стандартным диффузионным приближением (см., например, [28, 29]). В результате для интерференционного вклада в кондактанс приходим к следующему выражению:

$$\begin{aligned} \langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle &= -\frac{4}{3} \frac{l_{tr}}{L^2} \times \\ & \times \int d\mathbf{r} \langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}|\mathbf{h}) G_{ki}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}|-\mathbf{h}) \rangle_L. \end{aligned} \quad (6)$$

Если в выражении (6) пренебречь векторной природой электромагнитного поля (т.е. считать, что функция Грина G_{ik} пропорциональна δ_{ik}), то из (6) получим известный результат [2, 16–18] для поправки к электронному кондактансу на слабую локализацию в магнитном поле.

3. При диффузии света через образец рассеивающей среды только интенсивность волн с заданной спиральностью может затухать на расстояниях, существенно превышающих транспортную длину упругого рассеяния l_{tr} [30–33]. Линейно поляризованные

волны всегда затухают на расстояниях, не превышающих l_{tr} [30–33]. В связи с этим при вычислении куперона в диффузионном приближении учтем только медленно затухающие циркулярно поляризованные моды.

При $k_0 l \gg 1$ последовательные акты рассеяния происходят в волновой зоне, и входящий в (6) коррелятор $\langle G_{ik}(\mathbf{h}) G_{lj}^*(-\mathbf{h}) \rangle_L$ можно записать в представлении Вигнера следующим образом:

$$\begin{aligned} & \langle G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\mathbf{h}) G_{lj}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1|-\mathbf{h}) \rangle_L = \\ & \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)-i\mathbf{k}'(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'_1)} \frac{\delta(k-k_0)}{k^2} \frac{\delta(k'-k_0)}{k'^2} \\ & \Gamma_{il,kj} \left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{r}_1}{2}, \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k_0} \middle| \frac{\mathbf{r}'+\mathbf{r}'_1}{2}, \mathbf{n}' = \frac{\mathbf{k}'}{k_0} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где пропагатор $\Gamma_{il,kj}(\mathbf{r}, \mathbf{n}|\mathbf{r}', \mathbf{n}')$ подчиняется транспортному уравнению (см. рис. 3 и [23, 24]), которое аналогично уравнению переноса электромагнитных волн. При переходе из лабораторной системы отсчета в сопутствующую матрица $\Gamma_{il,kj}$ преобразуется как

$$\begin{aligned} \Gamma_{il,kj}(\mathbf{R}, \mathbf{n}|\mathbf{R}', \mathbf{n}') &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} e_i^{(\alpha)}(\mathbf{n}) \left(e_l^{(\beta)}(\mathbf{n}) \right)^* \\ & \Gamma_{\alpha\beta, \gamma\delta}(\mathbf{R}, \mathbf{n}|\mathbf{R}', \mathbf{n}') e_k^{(\gamma)}(\mathbf{n}') \left(e_j^{(\delta)}(\mathbf{n}') \right)^*, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ принимают значения ± 1 . Тройка векторов $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ и $\mathbf{e}^{(\pm)}(\mathbf{n}) = (\partial \mathbf{n} / \partial \theta \mp i[\mathbf{n} \times \partial \mathbf{n} / \partial \theta]) / \sqrt{2}$ образуют циркулярный базис (см., например, [34]).

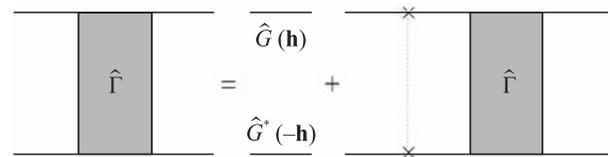


Рис. 3. Интегральное транспортное уравнение для пропагатора $\Gamma_{il,kj}$

Для того, чтобы перейти к приближению, в котором остаются только циркулярно поляризованные моды, в сумме (8) нужно сохранить слагаемые с $\alpha = \beta$ и $\gamma = \delta$. Тогда вместо (8) получаем [23]

$$\begin{aligned} \Gamma_{il,kj}(\mathbf{r}, \mathbf{n}|\mathbf{r}', \mathbf{n}') &= \\ & = \sum_{\alpha, \beta} P_{il}^{(\alpha)}(\mathbf{n}) \Gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{n}|\mathbf{r}', \mathbf{n}') P_{jk}^{(\beta)}(\mathbf{n}'), \end{aligned} \quad (9)$$

где $P_{il}^{(\alpha)}(\mathbf{n}) = e_i^{(\alpha)}(\mathbf{n}) \left(e_l^{(\alpha)}(\mathbf{n}) \right)^*$ – проекционные

операторы (4). Комбинируя формулы (6) и (9), для величины $\langle \delta T \rangle$ приходим к выражению

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle = -\frac{4}{3} \frac{l_{tr}}{L^2} \cdot \sum_{\alpha} \left[\int d\mathbf{r} \Gamma_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \right], \quad (10)$$

где $\Gamma_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{n} \int d\mathbf{n}' \Gamma_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{n} | \mathbf{r}', \mathbf{n}')$ – пропагатор плотности.

Если в исходном интегральном транспортном уравнении (см. рис. 3) для пропагатора $\Gamma_{il,kj}(\mathbf{r}, \mathbf{n} | \mathbf{r}', \mathbf{n}')$ перейти к представлению (9) и воспользоваться диффузионным приближением, то для пропагатора плотности $\Gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ получим систему диффузионных уравнений [23]

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{D}}_-^2 + \zeta^2 & -\zeta^2 - \chi \hat{\mathbf{D}}_+ \hat{\mathbf{D}}_- \\ -\zeta^2 - \chi \hat{\mathbf{D}}_+ \hat{\mathbf{D}}_- & \hat{\mathbf{D}}_+^2 + \zeta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Gamma_{++}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & \Gamma_{+-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \Gamma_{-+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & \Gamma_{--}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{pmatrix} = 3n_0\sigma_{tr}(1-\chi) \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где $\hat{\mathbf{D}}_{\pm} = -i\nabla \pm \mathbf{h}$,

$$\zeta^2 = 3n_0^2\sigma_{\text{dep}}(\sigma_{tr}^{(2)} + \sigma_{\text{dep}}) \cdot \frac{\sigma_{tr}}{\sigma_{tr} + \sigma_{tr}^{(2)} + \sigma_{\text{dep}}}, \quad (12)$$

$$\chi = \frac{\sigma_{tr} - \sigma_{tr}^{(2)} - \sigma_{\text{dep}}}{\sigma_{tr} + \sigma_{tr}^{(2)} + \sigma_{\text{dep}}}, \quad (13)$$

n_0 – число рассеивателей в единице объема, $\sigma_{tr} = \int d\mathbf{n}' (1 - (\mathbf{nn}'))a_1(\mathbf{nn}')$ и $\sigma_{tr}^{(2)} = \int d\mathbf{n}' (1 - (\mathbf{nn}'))a_2(\mathbf{nn}')$ – транспортные сечения рассеяния для интенсивности и четвертого параметра Стокса, $a_1(\mathbf{nn}')$ и $a_2(\mathbf{nn}')$ – диагональные элементы матрицы однократного рассеяния [34], $\sigma_{\text{dep}} = \int d\mathbf{n}' (a_1(\mathbf{nn}') - a_2(\mathbf{nn}'))$ – сечение рассеяния с переворотом спиральности [30, 32].

В отсутствие магнитного поля величины $\Gamma_{\pm\pm}$ и $\Gamma_{\pm\mp}$ могут быть выражены через интенсивность I и четвертый параметр Стокса V как $\Gamma_{++} = \Gamma_{--} = (I + V)/2$, $\Gamma_{+-} = \Gamma_{-+} = (I - V)/2$. В этом случае уравнение (11) сводится к двум независимым уравнениям диффузии для I и V [35].

В условиях медленного затухания циркулярной поляризации [30–32, 36] разница между $a_1(\mathbf{nn}')$ и $a_2(\mathbf{nn}')$ мала и, как следствие, $\sigma_{\text{dep}} \ll \sigma_{tr}$ и $\sigma_{tr} - \sigma_{tr}^{(2)} \ll \sigma_{tr}$. Параметр χ (13) также мал, $\chi \ll 1$. При сильной деполяризации, $\sigma_{tr} \sim \sigma_{\text{dep}}$, значение χ увеличивается. Например, в условиях рэлеевского рассеяния $\chi = 1/3$ [23], при рассеянии на Ми-частицах в

окрестности второй точки Керкера [36] $\chi = 1/2$. Согласно расчетам входящих в (12), (13) величин [37], при сильно деполяризующем рассеянии на коррелированных Ми-частицах параметр χ достигает значения $0.6 \div 0.7$.

4. Вычислим интерференционную поправку $\langle \delta T \rangle$ к кондактансу плоского слоя. Предполагаем, что $L_x, L_y \gg L \gg l_{tr}$, $l_{tr} = (n_0\sigma_{tr})^{-1}$. В случае относительно сильного магнитного поля, но в условиях применимости приближения диффузии, $1/L \ll h \ll 1/l_{tr}$, при вычислении пропагатора плотности $\Gamma_{\alpha\alpha}$ можно считать среду неограниченной. В этой ситуации

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle = -\frac{4\langle T \rangle}{\pi k_0^2 l_{tr}} \int_0^{\infty} Q^2 dQ \left[\frac{(1-\chi)(Q^2 + h^2 + \zeta^2)}{2Qh \cdot \Phi(Q)} \ln \frac{\Phi(Q) + 2Qh}{\Phi(Q) - 2Qh} - \left(\frac{1}{Q^2} + \frac{(1-\chi)}{(1+\chi)Q^2 + 2\zeta^2} \right) \right], \quad (14)$$

где $\langle T \rangle$ – оптический кондактанс (2),

$$\Phi(Q) = [(Q^2 + h^2)(Q^2 + h^2 + 2\zeta^2) - \chi(Q^2 - h^2)(\chi(Q^2 - h^2) + 2\zeta^2)]^{1/2}. \quad (15)$$

Выражение (14) определяет зависимость интерференционной поправки к кондактансу от магнитного поля. Как известно [2, 16, 18], сама интерференционная поправка в 3D случае расходится (каждый из вкладов в формуле (14) является расходящейся величиной). Наблюдаемым является изменение интерференционной поправки в зависимости от фактора, разрушающего интерференцию.

В условиях эффекта сохранения циркулярной поляризации, $\sigma_{\text{dep}} \ll \sigma_{tr}$ (в этом случае параметр χ также мал, $\chi \ll 1$), в зависимости $\langle \delta T \rangle$ от \mathbf{h} можно выделить два участка. При $h \ll n_0\sqrt{\sigma_{tr}\sigma_{\text{dep}}}$ величина $\langle \delta T \rangle$ линейно меняется с магнитным полем h ,

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle = \frac{2\langle T \rangle}{(k_0 l_{tr})^2} (h l_{tr}). \quad (16)$$

Согласно (14)–(16), в случае $h \gg 1/L$ интерференционный вклад δT не зависит от направления поля. Ориентационная зависимость проявляется только при $h \leq 1/L$, когда важны эффекты, обусловленные ограниченностью образца. Однако влияние поля на изменение интерференционной поправки в этом случае незначительно.

При $h \geq n_0 \sqrt{\sigma_{tr} \sigma_{dep}}$ интерференционный вклад $\langle \delta T \rangle$ выходит на плато (см. рис. 4) и стремится к

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle = \frac{2}{\sqrt{2} + 1} \frac{\langle T \rangle}{(k_0 l_{tr})^2} \sqrt{\frac{3\sigma_{dep}}{\sigma_{tr}}}. \quad (17)$$

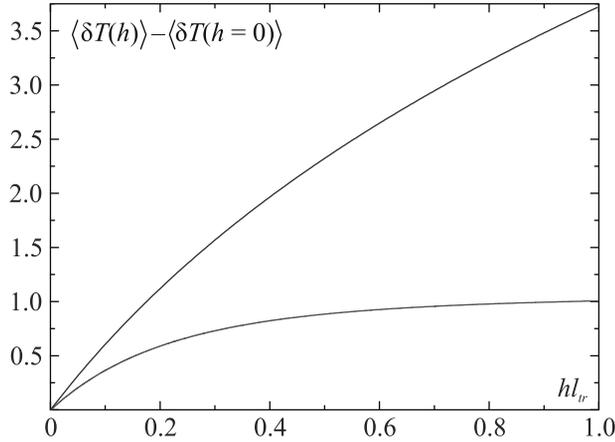


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изменение интерференционного вклада $\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle$ в оптический кондактанс с ростом магнитного поля в условиях эффекта медленного затухания циркулярной поляризации ($\chi = 0$, $\sigma_{tr}/\sigma_{dep} = 10$, нижняя кривая) и в его отсутствие (релеевские рассеиватели, $\chi = 1/3$, $\sigma_{tr}/\sigma_{dep} = 1$, верхняя кривая)

В отсутствие эффекта сохранения циркулярной поляризации, $\sigma_{dep} \sim \sigma_{tr}$ (например, для рэлеевского рассеяния $\chi = 1/3$ и $\sigma_{dep} = \sigma_{tr}$), наклон в линейной зависимости $\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle$ от h при $h \ll 1/l_{tr}$ увеличивается, а выход на плато сдвигается в область больших $h \sim 1/l_{tr}$, где диффузионное описание теряет свою применимость (см. рис. 4).

Выход на плато зависимости $\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle - \langle \delta T(\mathbf{h} = 0) \rangle$ от магнитного поля можно объяснить уменьшением вероятности деполяризующих столкновений на длине h^{-1} с ростом поля. В сильном поле, $h \gg \zeta$, при медленном затухании циркулярной поляризации, $\chi \ll 1$, недиагональными элементами в системе уравнений (11) можно пренебречь, и тогда (11) сводится к двум независимым уравнениям

$$\left\{ \left(\frac{1}{i} \nabla \pm \mathbf{h} \right)^2 + \zeta^2 \right\} \Gamma_{\pm\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 3n_0 \sigma_{tr} (1 - \chi) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (18)$$

Преобразованием

$$\Gamma_{\pm\pm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \Gamma_{scal}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{\mp i \mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (19)$$

магнитное поле исключается из уравнения (18). При совпадающих аргументах из (19) следует равенство $\Gamma_{\pm\pm}(\mathbf{r} = \mathbf{r}') = \Gamma_{scal}(\mathbf{r} = \mathbf{r}')$, и интерференционный вклад в кондактанс (6) оказывается независимым от магнитного поля. Входящая в (19) величина – скалярный куперон $\Gamma_{scal}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ – удовлетворяет диффузионному уравнению с коэффициентом затухания ζ , который описывает рассеяние с переворотом спиральности.

5. При распространении света в волноводе, $L_x, L_y \ll L$ (Q1D-геометрия), ситуация меняется. В этом случае, если не рассматривать волновод со специально подобранным поперечным профилем показателя преломления, эффект сохранения циркулярной поляризации подавляется. При каждом отражении от боковых границ волновода знак циркулярной поляризации меняется на противоположный [38]. В этой ситуации основной вклад в интерференционную поправку (10) будет давать выживающая при больших L линейная комбинация элементов $\Gamma_{\pm\pm} + \Gamma_{\pm\mp}$, которая в отсутствие магнитного поля соответствует скалярной моде – интенсивности. Разность $\Gamma_{\pm\pm} - \Gamma_{\pm\mp}$ затухает на масштабах L_x, L_y и оказывается малой величиной. Поэтому в первом приближении можно считать, что все элементы $\Gamma_{\alpha\beta}$ равны друг другу, $\Gamma_{\alpha\beta} = \Gamma$, и подчиняются уравнению

$$\left[\nabla^2 - \frac{1 + \chi}{1 - \chi} \cdot h^2 \right] \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{3}{2} n_0 \sigma_{tr} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (20)$$

с граничными условиями

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{z=0, L} = 0, \quad (21)$$

на входном и выходном сечениях волновода и

$$\frac{\partial}{\partial x} \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{x=\pm L_x/2} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial y} \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{y=\pm L_y/2} = 0 \quad (22)$$

на боковых поверхностях волновода.

Решение уравнения (20) можно искать в виде разложения по собственным модам $\cos q_{xn}x \cos q_{ym}y$, где $q_{xn} = (2\pi n/L_x)$, $q_{ym} = (2\pi m/L_y)$ ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Тогда формула (10) преобразуется следующим образом:

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle = -\frac{8}{3} \frac{l_{tr}}{L^2} \left[\sum_{\mathbf{q}} \int_0^L dz \Gamma(z, z|\mathbf{q}) \right], \quad (23)$$

где $\Gamma(z, z|\mathbf{q})$ – коэффициенты разложения величины $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по собственным поперечным модам волново-

да. Согласно (20) и (21), они определяются следующим выражением

$$\Gamma(z, z|\mathbf{q}) = \frac{3}{4\gamma l_{tr}} \frac{\text{sh}\gamma z \cdot \text{sh}(\gamma(L-z))}{\text{sh}\gamma L}. \quad (24)$$

где

$$\gamma^2 = \mathbf{q}^2 + \tilde{h}^2, \quad \tilde{h} = \sqrt{\frac{1+\chi}{1-\chi}} \cdot h \quad (25)$$

В Q1D геометрии ($L \gg L_x, L_y$) мода с $\mathbf{q} = 0$ характеризуется наименьшим затуханием. Оставляя в (23) только слагаемое с $\mathbf{q} = 0$, для интерференционного вклада в кондактанс получаем

$$\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle = -\frac{1}{(\tilde{h}L)} \left[\text{cth}(\tilde{h}L) - \frac{1}{\tilde{h}L} \right]. \quad (26)$$

Зависимость $\langle \delta T \rangle$ от магнитного поля проиллюстрирована на рис. 5.

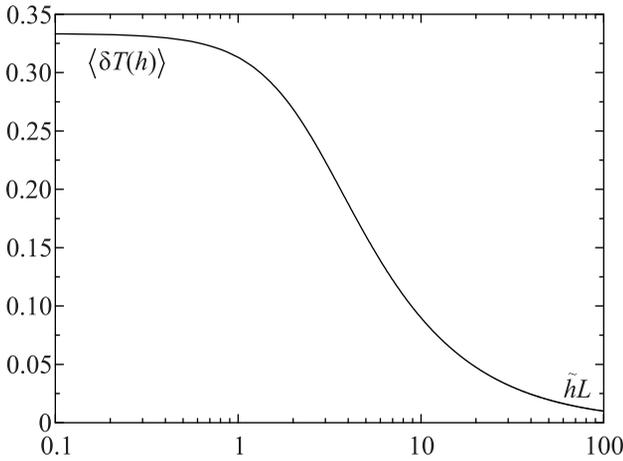


Рис. 5. Интерференционный вклад $\langle \delta T(\mathbf{h}) \rangle$ в оптический кондактанс Q1D-образца как функция магнитного поля

В пределе $h = 0$ из (26) следует известный результат [39] для интерференционного вклада в кондактанс скалярных волн $\langle \delta T \rangle = -1/3$. При больших h величина $\langle \delta T \rangle$ убывает как $-1/\tilde{h}L$. Качественно изменение $\langle \delta T \rangle$ с ростом поля напоминает поведение интерференционной поправки к электронному кондактансу [17, 16], однако соответствующие функциональные зависимости различаются.

6. Проанализируем, как меняется интерференционный вклад в оптический кондактанс в зависимости от отношения $\sigma_{\text{dep}}/\sigma_{tr}$ и напряженности магнитного поля.

В отсутствие магнитного поля ($h = 0$) интерференционная поправка $\langle \delta T \rangle$ к кондактансу в случае, когда вообще нет деполаризации (т.е., нет перемешивания поляризаций из-за рассеяния, и в (6)

$\langle G_{ik}G_{ki}^* \rangle = 2I$ [35], где I – интенсивность), была бы равна $2\langle \delta T^{(sc)} \rangle$, где $\langle \delta T^{(sc)} \rangle < 0$ – соответствующий результат в приближении скалярных волн. В условиях редких столкновений с изменением спиральности ($\sigma_{\text{dep}} \ll \sigma_{tr}$) интерференционный вклад в оптический кондактанс приобретает дополнительное слагаемое

$$\langle \delta T \rangle = 2\langle \delta T^{(sc)} \rangle + \frac{2\langle T \rangle}{(k_0 l_{tr})^2} \sqrt{\frac{3\sigma_{\text{dep}}}{\sigma_{tr}}}. \quad (27)$$

Соотношение (27) определяется вторым слагаемым выражения (14). В случае сильной деполаризации волн, когда изменение спиральности происходит при каждом рассеянии, $\langle \delta T \rangle = \langle \delta T^{(sc)} \rangle$ (это следует непосредственно из формулы (6) при $\langle G_{ik}G_{ki}^* \rangle = I$ [35]).

Если не было бы рассеяния волн с изменением спиральности, то при наложении магнитного поля интерференционный вклад в оптический кондактанс остался бы неизменным, $\langle \delta T \rangle = 2\langle \delta T^{(sc)} \rangle$ (см. (14)). Деполаризация включает влияние магнитного поля на величину $\langle \delta T \rangle$. В условиях медленной деполаризации ($\sigma_{\text{dep}} \ll \sigma_{tr}$) изменение интерференционного вклада с магнитным полем описывается выражениями (16)–(17), и при $h \gg n_0 \sqrt{\sigma_{\text{dep}} \sigma_{tr}}$ величина $\langle \delta T \rangle$ стремится к значению

$$\langle \delta T \rangle = 2\langle \delta T^{(sc)} \rangle + \frac{2\langle T \rangle}{(k_0 l_{tr})^2} \sqrt{\frac{6\sigma_{\text{dep}}}{\sigma_{tr}}}, \quad (28)$$

т.е., отличие $\langle \delta T \rangle$ от $2\langle \delta T^{(sc)} \rangle$ меняется при изменении поля h от нуля до больших значений приблизительно в полтора раза.

При сильной деполаризации интерференционный вклад в кондактанс с ростом напряженности магнитного поля стремится к нулю. В условиях диффузии волн через Q1D-образец (волновод) реализуется именно этот случай.

Следует отметить, что в Q1D-случае магнитное поле позволяет управлять переходом к режиму андерсоновской локализации света в длинном, $L \sim \sim l_{\text{loc}} = \mathcal{N}l_{tr}$ [39], волноводе. Поскольку $\langle T \rangle$ и $\langle \delta T \rangle$ убывают с ростом L как $1/L$ (см. (2) и (26)), то переход к режиму андерсоновской локализации нарушается при $\tilde{h} > h_c \sim 1/\mathcal{N}l_{tr}$. В многомодовом оптоволокне ($\mathcal{N} \gg 1$) критическое значение магнитного поля h_c оказывается намного меньше, чем то, которое приводит к заметному эффекту в когерентном обратном рассеянии от фарадеевской среды [21, 23]. При транспорте электронов в Q1D-системах (проводах) наблюдать подобный эффект трудно, поскольку при увеличении L происходит разрушение когерентности электронных волн из-за неупругих взаимодействий, температуры и других факторов [17, 18].

Авторы благодарят В. В. Маринюка за полезное обсуждение рассмотренных в статье вопросов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор # 075-15-2021-1361 от 07.10.2021).

1. *Analogies in Optics and Microelectronics*, ed. by W. van Haeringen and D. Lenstra, Kluwer, Dordrecht (1990).
2. E. Akkermans and G. Montambaux, *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons*, University Press, Cambridge (2007).
3. S. Rotter and S. Gigan, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015005 (2017).
4. O. L. Muskens, J. G. Rivas, R. E. Algra, E. P. A. M. Bakkers, and A. Lagendijk, *Nano Lett.* **8**, 2638 (2008).
5. B. Redding, S. F. Liew, R. Sarma, and H. Cao, *Nat. Photonics* **7**, 746 (2013).
6. B. Redding, S. M. Popoff, and H. Cao, *Opt. Express* **21**, 6584 (2013).
7. N. Bachelard, S. Gigan, X. Noblin, and P. Sebbah, *Nat. Phys.* **10**, 426 (2014).
8. K. Y. Bliokh, S. A. Gredeskul, P. Rajan, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. B* **85**, 014205 (2012).
9. L. Schertel, O. Irtenkauf, C. M. Aegerter, G. Maret, and G. J. Aubry, *Phys. Rev. A* **100**, 043818 (2019).
10. T. Goto, A. V. Dorofeenko, A. M. Merzlikin, A. V. Baryshev, A. P. Vinogradov, M. Inoue, A. A. Lisyansky, and A. B. Granovsky, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 113902 (2008).
11. F. Scheffold and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5800 (1998).
12. A. A. Chabanov, N. P. Trégourès, B. A. van Tiggelen, and A. Z. Genack, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 173901 (2004).
13. K. Fang, Z. Yu, and S. Fan, *Phys. Rev. B* **87**, 060301(R) (2013).
14. F. Yang and Y. Li, *Phys. Rev. B* **94**, 165439 (2016).
15. M. C. W. van Rossum and T. M. Nieuwenhuizen, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 313 (1999).
16. B. L. Altshuler, A. G. Aronov, D. E. Khmel'nitskii, and A. I. Larkin, *Quantum Theory of Solids*, Mir, Moscow (1982), p. 130.
17. G. Bergmann, *Phys. Rep.* **107**, 1 (1984).
18. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
19. Y. Bromberg, B. Redding, S. M. Popoff, and H. Cao, *Phys. Rev. A* **93**, 023826 (2016).
20. M. Estakhri, N. M. Estakhri, and T. B. Norris, doi.org/10.1038/s41598-022-25465-y (2022).
21. R. Lenke, R. Lehner, and G. Maret, *Europhys. Lett.* **52**, 620 (2000).
22. E. E. Gorodnichev and D. B. Rogozkin, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1686**, 012024 (2020).
23. E. E. Gorodnichev, K. A. Kondratiev, and D. B. Rogozkin, *Phys. Rev. B* **105**, 104208 (2022).
24. A. A. Голубенцев, *Изв. ВУЗов. Радиофизика* **27**, 734 (1984) [A. A. Golubentsev, *Quantum Electron.* **27**, 506 (1984)].
25. A. A. Голубенцев, *ЖЭТФ* **86**, 47 (1984) [A. A. Golubentsev, *Sov. Phys. JETP* **59**, 26 (1984)].
26. F. C. MacKintosh and S. John, *Phys. Rev. B* **37**, 1884 (1988).
27. A. K. Zvezdin and V. A. Kotov, *Modern magneto-optics and magneto-optical materials*, Taylor & Francis Group, N.Y. (1997), p. 404.
28. E. E. Городничев, А. И. Кузовлев, Д. Б. Рогозкин, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 649 (2009) [E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, D. B. Rogozkin, *JETP Lett.* **89**, 547 (2009)].
29. E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, and D. B. Rogozkin, *JOSA A* **33**, 95 (2016).
30. F. C. MacKintosh, J. X. Zhu, D. J. Pine, and D. A. Weitz, *Phys. Rev. B* **40**, 9342 (1989).
31. D. Bicoût, C. Brosseau, A. S. Martinez, and J. M. Schmitt, *Phys. Rev. E* **49**, 1767 (1994).
32. E. E. Городничев, А. И. Кузовлев, Д. Б. Рогозкин, *Письма в ЖЭТФ* **68**, 21 (1998) [E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, D. B. Rogozkin, *JETP Lett.* **68**, 22 (1998)].
33. E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, and D. B. Rogozkin, *Phys. Rev. E* **90**, 043205 (2014).
34. M. I. Mishchenko, *Electromagnetic Scattering by Particles and Particle Groups*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).
35. E. E. Городничев, А. И. Кузовлев, Д. Б. Рогозкин, *ЖЭТФ* **133**, 839 (2008) [E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, and D. B. Rogozkin, *JETP* **106**, 731 (2008)].
36. E. E. Городничев, А. И. Кузовлев, Д. Б. Рогозкин, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 155 (2016) [E. E. Gorodnichev, A. I. Kuzovlev, D. B. Rogozkin, *JETP Lett.* **104**, 157 (2016)].
37. R. Lenke, C. Eisenmann, D. Reinke, and G. Maret, *Phys. Rev. E* **66**, 056610 (2002).
38. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982) [L. D. Landau, L. P. Pitaevskii, E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, vol. 8 in *Course of Theoretical Physics*, Second Edition, Elsevier (1984)].
39. C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).

Magnetism, non-Fermi-liquid behavior and deconfinement in Kondo lattices

V. Yu. Irkhin¹⁾

M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, 620077 Ekaterinburg, Russia

Submitted 22 May 2023

Resubmitted 24 May 2023

Accepted 24 May 2023

DOI: 10.31857/S1234567823130086, EDN: gbougq

Anomalous f -systems, which are usually described as Kondo lattices, show unusual behavior of thermodynamic and transport properties, e.g., large electron specific heat, $\gamma = C/T \sim 1/T_K$ (T_K the Kondo temperature) or even a non-Fermi-liquid behavior. At the same time, a number of such systems with frustrated magnetic structures demonstrate spin-liquid features with $\gamma \sim 1/J$ where J is the Heisenberg exchange interaction.

A scaling theory of the Kondo lattices [1, 2] demonstrates that during the scaling procedure the process of magnetic moment compensation terminates somewhere at the boundary of the strong coupling region, which can result in the formation of a finite (although possibly small) saturation moment. Thus a unified energy scale is established, both the effective spin-fluctuation frequency (i.e., J) and T_K being strongly renormalized, as well as frustration parameters [3].

In Ref. [4], a mean-field description of the magnetic ground state of the Kondo lattices was proposed. Here we generalize this approach and formulate the effective hybridization model describing the competition of magnetic and non-magnetic Kondo and spin-liquid states. We also go beyond the mean-field theory by taking into account fluctuations contribution, including gauge field ones.

Unlike previous works [5], we use the formulation by Coleman and Andrei [6] which reduces the $s - f$ exchange coupling to the effective hybridization V and yields the correct value of the Kondo temperature T_K . As for Heisenberg term, we use the representation of pseudofermions $f_{i\sigma}^\dagger$. In the spin-liquid state, they are essentially operators of spinons – neutral fermions which have dispersion on the scale J , so that the spinon Fermi surface is formed. The single-occupancy constraint can be enforced by a gauge field. The presence of hybridization results in the formation of a unified “large” Fermi surface including both conduction electrons and f -states.

To take into account fluctuations effects, we use the slave-particle representation $f_{i\sigma} \rightarrow f_{i\sigma} b_i$, the effective hybridization being determined by the boson condensate $b_0 = \langle b \rangle$. Fluctuations can destroy the condensate picture, so that b_0 vanishes. Then we obtain a spin-liquid-like state where spinon and electron Fermi surfaces are distinct, i.e., a “small” Fermi surface. This state was called fractionalized Fermi-liquid (FL*) [7].

In the quantum critical regime, a topological transformation from large Fermi surface (Kondo lattice state) to small Fermi surface is possible, which can be accompanied by magnetic-order instability. A topological “Kondo breakdown” transition can occur between FL* and “usual” heavy Fermi liquid (FL) states. In the spin-liquid state, gauge field fluctuations can play a role in thermodynamics and heat transport even in the insulating phase (in the absence of conduction electrons, but in the presence of the spinon Fermi surface). In particular, there occurs a spinon contribution to specific heat. This contribution remains in FL* state and in FL state near the topological transition. As demonstrate the calculation [7], the specific heat coefficient $\gamma = C/T$ diverges logarithmically at $T \rightarrow 0$ in the FL* phase, which means the non-Fermi-liquid behavior (in the $2d$ case, $C(T) \sim T^{2/3}$). At approaching the transition from the FL side, we have $\gamma \sim \ln(1/b_0)$.

In the quantum critical regime, the fluctuations of order parameter field b yield additional contributions to thermodynamic properties. Unlike gauge field (neutral spinon) ones, they contribute also to electronic transport. Due to mismatch of electron and spinon Fermi surfaces, the decay of bosons into particle-hole pairs becomes possible above an energy E^* , which can be small if the distance between the two Fermi surfaces is small. Then at $T > E^*$ one obtains a $T \ln T$ contribution to specific heat. Besides that, the fluctuation scattering results in the $T \ln T$ dependence of resistivity $R(T)$ in this regime [8]. For $T < E^*$, the behavior of thermodynamic and transport properties depends on that the Fermi surfaces intersect or not [9]. In the first case we have $R(T) \sim T^{3/2}$ and $R(T) \sim T \ln T$ in $3d$ and $2d$

¹⁾e-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

cases, respectively. In the FL states, this contribution is cut at the Kondo gap of order of T_K , which is related to the boson condensate, $T_K \simeq \pi\rho V^2 b_0^2$ in the vicinity of the critical point.

The FL* state with the spinon Fermi surface should be unstable with to a broken-symmetry antiferromagnetic (AFM) ordering (spin-density wave, SDW state) with the wvector \mathbf{Q} [7]. The exotic AFM order on the spinon Fermi surface is called AFM* or SDW* phase. The presence of an SDW* condensate does not cause a radical change in the structure of the gauge fluctuation in comparison with the FL* state: the spinons remain deconfined and coupled to a gapless U(1) gauge field. The gauge field excitations coexist with the gapless Goldstone magnon mode and with a Fermi surface of conduction electrons. Because of the broken translational symmetry, there is no clear difference between small and large Fermi surfaces now [7].

With increasing $s - d(f)$ exchange coupling, the deconfined phase with small Fermi surface can pass first into usual itinerant AFM state with a large Fermi surface volume, and then into FL state. The spinon Fermi surface of the FL*-phase is expected to evolve smoothly into the FL region in some vicinity of the topological transition, so that the SDW order can continue to FL in the ground state, as discussed in [1]. Thus there is no sharp transition between the FL and FL* regions, and there is instead expected to be a large intermediate quantum-critical region [7].

The contribution of transverse spin fluctuation to conduction-electron self-energy reads

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(E) = V^2 \overline{S} \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}})^2 \times \left(\frac{1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}}}{E - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}} + \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}}}{E - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}} \right), \quad (1)$$

where $n_{\mathbf{k}} = \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ and $N_{\mathbf{q}} = \langle \beta_{\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{q}} \rangle$ are Fermi and Bose functions of spinons and magnons, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ the spinon spectrum, $u_{\mathbf{q}}, v_{\mathbf{q}}$ the Bogoliubov transformation factors.

The contribution (1) is similar to that of the usual perturbation theory in the $s - d(f)$ exchange model [10], but works on the scale of the spinon bandwidth. In the FL* state the hybridization V plays the role of the $s - f$ exchange parameter and mediates the RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) type interaction between f -states. The contribution (1) survives in the FL state where a unified electron-spinon Fermi surface arises and a correlated $s - f$ band with narrow density-of-states peaks is formed. However, in such a situation the spectrum $\epsilon_{\mathbf{k}}$ and prefactor in (1) change.

In the case of weak antiferromagnetism we have an energy scale $T^* = (\Delta/v_F)J$ (Δ is the AFM splitting of the spectrum), so that for $T^* < T < J$ the transitions between AFM subbands become singular. It should be

noted that the splitting and magnon frequency are, generally speaking, renormalized in a different way – both in scaling equations [1] and due to frustrations. This favors formation the scale T^* even in the absence of the small parameter of the $s - f$ exchange coupling I .

In the general $d = 3$ case we have $\text{Im}\Sigma^{(2)}(E) \propto E^2$ for $T^* < T < J$. For $d = 2$ $\text{Im}\Sigma(E)$ is linear in $|E|$. The corresponding intersubband correction to specific heat can be derived similar to [10]. In the $2d$ (or “nesting” $3d$) case the integral in (1) is logarithmically divergent at $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ and the divergence is cut at $\max(T, T^*)$, so that

$$\delta C_{\text{inter}}(T) \propto T \ln \frac{\bar{\omega}}{\max(T, T^*)}. \quad (2)$$

Thus for $T > T^*$ we obtain the $T \ln T$ -dependence. The result (2) holds also in the case of frustrated ($2d$ -like) magnon spectrum. For the $2d$ magnon spectrum or “nested” $3d$ situation one obtains for spin-wave resistivity

$$R(T) \propto T \ln(1 - \exp(-T^*/T)) \simeq T \ln(T/T^*).$$

The role of magnetic fluctuations depends on the relation between J and T_K (in frustrated and low-dimensional systems with strong short-range order the scale J can be considerably larger than T_N). Similar to [4], we can find singular corrections to sublattice magnetization owing to spin-wave damping, which may be of order of unity.

The research was carried out within the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Quantum” # 122021000038-7).

This is an excerpt of the article “Magnetism, non-Fermi-liquid behavior and deconement in Kondo lattices”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601537

1. V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **56**, 8109 (1997).
2. V. Yu. Irkhin, Phys.-Uspekhi **60**, 74 (2017).
3. V. Yu. Irkhin, J. Phys.: Cond. Mat. **32**, 125601 (2020).
4. V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, Z. Phys. B **82**, 77 (1991).
5. S. V. Kusminskiy, K. S. D. Beach, A. H. Castro Neto, and D. K. Campbell, Phys. Rev. B **77**, 094419 (2008).
6. P. Coleman and N. Andrei, J. Phys.: Condens. Matter. **1**, 4057 (1989).
7. T. Senthil, M. Vojta, and S. Sachdev, Phys. Rev. B **69**, 035111 (2004).
8. I. Paul, C. Pepin, and M. Norman, Phys. Rev. Lett. **98**, 026402 (2007).
9. C. Pepin, Phys. Rev. B **77**, 245129 (2008).
10. V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **52**, 6181 (1995).

Эволюция электронных свойств твердых растворов $\text{SrFe}_{1-x-y-z}\text{Al}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ в зависимости от состава и степени локализации электронных состояний

В. М. Зайнуллина^{+*1)}, М. А. Коротин^{*1)}, В. Л. Кожевников⁺¹⁾

⁺Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

^{*}Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 2023 г.

После переработки 25 мая 2023 г.

Принята к публикации 25 мая 2023 г.

Методом когерентного потенциала изучен генезис электронного спектра в кубических твердых растворах феррита стронция $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-2x}\text{Al}_x\text{Co}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$, где $0 \leq x \leq 0.15$ и $0 \leq y, z \leq 0.125$. Учет электронных корреляций на $3d$ атомах позволил воспроизвести экспериментальные концентрационные тенденции изменения электронных и магнитных свойств. Показано, что солегирование феррита кобальтом и алюминием эффективно повышает как концентрацию электронных носителей, так и степень их локализации в $\text{SrFe}_{1-x-0.15}\text{Al}_x\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$, что представляет интерес при разработке оксидных термоэлектриков. Относительно большой вклад делокализованных состояний на уровне Ферми позволяет идентифицировать твердые растворы $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$, где $y = z = 0.1-0.12$, в качестве перспективных электродных материалов.

DOI: 10.31857/S1234567823130098, EDN: gbxpmt

Значительный интерес к перовскитоподобным оксидам ABO_3 ($A = \text{Sr}, \text{La}$) переходных металлов (ПМ) связан с их уникальными свойствами, такими, например, как металлическая проводимость, колоссальное магнетосопротивление, высокотемпературная сверхпроводимость, ферромагнетизм и др. [1–3]. В частности, необычное сочетание транспортных и магнитных характеристик обнаружено в кубических фазах SrVO_3 , где $B = \text{Mn}, \text{Fe}$ и Co . Например, стехиометрические оксиды SrFeO_3 и SrCoO_3 имеют проводимость металлического типа ($\sim 10^3 \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$) [4, 5]. При этом, SrFeO_3 является неколлинеарным антиферромагнетиком [6], SrCoO_3 – ферромагнетиком [5], а SrMnO_3 – коллинеарным антиферромагнетиком [7]. Интересно, что для кубической структуры SrCoO_3 характерны высокие значения коэффициента Зеебека [8]. Также обнаружено, что даже относительно небольшие концентрации легирующей добавки ($\sim 5-25$ ат. %) в В-подрешетке приводят к значительным изменениям свойств [9–12]. В частности, в твердых растворах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ возникает магнитный переход из антиферромагнитного (АФМ) состояния в ферромагнитное (ФМ) око-

ло $x = 0.2$ [9], сопровождающийся аномалиями электросопротивления и магнитного момента [9–11]. Более сложные схемы солегирования, например, $\text{SrFe}_{1-x-y-z}\text{Al}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$, позволяют влиять на термодинамическую стабильность, термоэдс и другие свойства [12]. Электромагнитные свойства таких твердых растворов в значительной мере определяются электронной структурой вблизи уровня Ферми, которая, в свою очередь, зависит от степени локализации $3d$ электронов и силы электронных корреляций на узлах ПМ [5, 13]. Однако систематическое моделирование особенностей электронного спектра во взаимосвязи с изменениями состава твердых растворов $\text{SrFe}_{1-x-y-z}\text{Al}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ до настоящего времени не проводилось.

Современные подходы к моделированию электронной структуры сложных твердофазных соединений основаны на теории функционала электронной плотности [14] и используют ряд приближений. Для магнитных материалов наиболее широко применяется приближение локальной спиновой плотности (LSDA) [15]. Тем не менее расчеты электронных спектров ABO_3 методом LSDA часто приводят к недостаточно корректным результатам [16], поскольку электронные корреляции учитываются недостаточно [17]. В расчетах таких сильно коррелированных соедине-

¹⁾e-mail: veronika@ihim.uran.ru; michael.korotin@imp.uran.ru; kozhevnikov@ihim.uran.ru

ний широко применяется метод LSDA + U [18], в котором используется важный параметр кулоновского (U) взаимодействия на d -оболочке ПМ. В выборе параметра U существует большая неопределенность даже в случае простых перовскитов ABO_3 . Так, для отдельных соединений, например, $SrFeO_3$ и $SrCoO_3$, в зависимости от базисного набора волновых функций, валентности и спинового состояния ПМ, величина параметра может меняться в пределах $U \sim 3.0\text{--}7.5$ эВ [13, 19–21]. Очевидно, что в случае наличия нескольких $3d$ элементов одновременно в В-подрешетке вопрос о выборе наиболее подходящих значений параметра U остается открытым [22]. Не менее важным эффектом является разная степень локализации t_{2g} - и e_g -состояний в перовскитах ABO_3 [5, 23, 24]. Сильная В $3d(e_g) - O 2p$ гибридизация приводит к уширению полос e_g симметрии (делокализации), в то время как состояния t_{2g} симметрии образуют узкие (локализованные) зоны. Обычно данный эффект не учитывается в расчетах. Другой эффект, который влияет на формирование электронных свойств многокомпонентно легированного феррита – разупорядочение примесей. Применение традиционных подходов, основанных на использовании сверхъядечек, в данном случае приводит к методическим проблемам учета псевдоупорядочения допантов, особенно в случае наличия нескольких типов примесей. Альтернативным подходом к расчету электронного спектра неупорядоченных твердофазных систем является приближение когерентного потенциала (КП) [25]. В настоящей работе была использована современная версия метода когерентного потенциала [26], основанная на идеях теории динамического среднего поля [27], которая позволяет учитывать эффекты разупорядочения, вызванные примесью [28]. В рамках данной версии метода когерентного потенциала возможно проведение расчетов электронной структуры сильно коррелированных систем в приближении LSDA + U [29, 30] и с разной степенью локализации t_{2g} и e_g состояний на $3d$ -оболочках атомов ПМ.

Исследование концентрационных зависимостей электронных свойств проведено для кубических стехиометрических твердых растворов $SrFe_{1-x}Al_xO_3$, $SrFe_{1-x}Mn_xO_3$, $SrFe_{1-x}Co_xO_3$, $SrFe_{1-x-0.15}Al_xCo_{0.15}O_3$, $SrFe_{1-y-z}Mn_yCo_zO_3$ в пределах области гомогенности, $0 \leq x \leq 0.15$, $0 \leq y \leq 0.125$ и $0 \leq z \leq 0.125$. Установлена взаимосвязь электронных свойств твердых растворов (положение примесных Mn и Co полос t_{2g} и e_g симметрии относительно уровня Ферми E_F , полная плотность состояний на уровне Ферми $n(E_F)$,

степень локализации состояний на E_F , величина спинового магнитного момента, заселенность d -орбиталей, спиновое состояние атомов ПМ и др.) с экспериментальными электротранспортными и магнитными свойствами. Показано, что твердые растворы $SrFe_{1-x-0.15}Al_xCo_{0.15}O_3$ с высокими значениями $n(E_F)$ и вкладом локализованных состояний Co в $n(E_F)$ представляют интерес для создания термоэлектрика, а составы $SrFe_{1-y-z}Mn_yCo_zO_3$ с доминированием делокализованных состояний Co и Mn в $n(E_F)$, при $y = z = 0.1\text{--}0.12$, являются перспективным электродным материалом.

Таблица 1. Вычисленные потенциальные параметры ΔV в примесных узлах железа (эВ)

Параметр	Al _{Fe}	Mn _{Fe}	Co _{Fe}
$\Delta V(s)^\uparrow$	-8.8682	0.3396	-0.5237
$\Delta V(s)^\downarrow$	-8.8682	-0.3065	-0.9042
$\Delta V(p)^\uparrow$	-15.4571	3.2053	-1.3748
$\Delta V(p)^\downarrow$	-15.4571	3.0677	-2.4481
$\Delta V(d)^\uparrow$	41.3765	1.5972	0.8328
$\Delta V(d)^\downarrow$	41.3765	1.0047	-0.8308

В качестве исходных данных в расчетах методом когерентного потенциала использовали гамильтониан беспримесной системы $H_0(k)$, потенциальные параметры $\Delta V(s)$, $\Delta V(p)$ и $\Delta V(d)$, описывающие влияние одиночного “примесного” атома на состояния “собственного” атома, и параметры кулоновского взаимодействия $U(t_{2g}\text{-Mn})$, $U(t_{2g}\text{-Fe})$ и $U(t_{2g}\text{-Co})$. Самосогласованный гамильтониан $H_0(k)$ был построен для расчетной ячейки $Sr_2Fe_2O_6$ ($z = 2$), полученной из кубической ячейки с экспериментальным параметром $a_c = 3.864 \text{ \AA}$, являющимся средним параметром для синтезированных фаз $SrFe_{1-x}Al_xO_3$, $SrFe_{1-x}Mn_xO_3$ и $SrFe_{1-x}Co_xO_3$. При этом была использована процедура проектирования гамильтониана на l_{mto} -орбиталях, установленного ранее в $tb_{l_{mto}}\text{-asa}$ расчетах [31] на соответствующие Ванье-орбитали [32]. Выбор размера ячейки обусловлен предположением о наличии антиферромагнитного упорядочения G-типа, т.е. антипараллельной ориентации спинов ближайших атомов железа [6]. Величины $\Delta V(s)$, $\Delta V(p)$ и $\Delta V(d)$ в табл. 1 определяли, как разность центров s , p и d зон примеси и наиболее удаленного от примеси атома железа, вычисленную из самосогласованного l_{mto} гамильтониана сверхъядечки $Sr_8Fe_7VO_{24}$ с использованием процедуры проектирования [32]. Для примеси Mn был принят АФМ дальний порядок G-типа, для примеси Co – ФМ, установленные в экспериментах [5, 7, 9]. В l_{mto} расчетах

использовали валентные $5s$ -, $4p$ -, $5d$ -орбитали Sr; $3s$ -, $3p$ -, $3d$ -орбитали Al; $4s$ -, $4p$ -, $3d$ -орбитали Mn, Fe и Co, и $1s$ -орбитали пустых сфер в междоузельных позициях перовскита SrFeO_3 . Радиусы маффин-тин сфер для Sr, Fe (Al, Mn, Co), O и двух типов пустых сфер E1 и E2 выбирали равными 3.26, 1.76, 2.36 и 0.77, 1.01 а.е., соответственно. Электронные корреляции на $3d$ -оболочках атомов учитывались в приближении LSDA + U [18].

Выбранные параметры кулоновского взаимодействия $U(t_{2g})$ для t_{2g} состояний Mn, Fe и Co составили 2.0, 3.2 и 1.2 эВ соответственно. Выбор значений $U(t_{2g})$ основан на предварительных расчетах, позволивших достичь наилучшего совпадения вычисленных электронных спектров при использовании экспериментальных параметров кубической ячейки и магнитного порядка и экспериментальных рентгеновских спектров эмиссии/поглощения для кубических оксидов SrBO_3 . Величина параметра U широких делокализованных полос e_g симметрии считалась равной нулю [24]. Значения параметров обменного взаимодействия J , полученные из предварительных LSDA расчетов стехиометрических перовскитов SrMnO_3 , SrFeO_3 и SrCoO_3 по методике [32], составили 0.72, 0.65 и 0.32 эВ соответственно.

Стехиометрический феррит SrFeO_3 и твердый раствор $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$. Вычисленный электронный спектр стехиометрического АФМ феррита стронция SrFeO_3 , (рис. 1а, для одной проекции спина) включает широкую полосу гибридных O $2p$ – Fe $3d$ -состояний, частично заполненную полосу антисвязывающих Fe e_g^\uparrow (черная область) и O $2p$ состояний и пустые полосы антисвязывающих Fe t_{2g}^\downarrow - и Fe e_g^\downarrow -состояний (синяя область). Два основных максимума около -6.0 и -2.5 эВ, на размытой гауссианом полной плотности состояний (рис. 1а, красная линия) совмещаются с максимумами рентгеновского спектра фотоэмиссии SrFeO_3 [33, 34]. Энергетический интервал 1.9 эВ между пиками t_{2g}^\downarrow и e_g^\downarrow -симметрии в зоне проводимости, практически совпадает с экспериментальным значением 2.0 эВ [33, 34]. Небольшая плотность состояний на уровне Ферми позволяет объяснить наблюдаемый в эксперименте металлический тип проводимости в SrFeO_3 [4]. Вычисленная величина магнитного момента, $3.25 \mu_B$, на ионах железа согласуется с экспериментальными значениями $3.1 \mu_B$ [35] и $3.3 \mu_B$ [4]. Полная заселенность Fe $3d$ орбиталей ($d^\uparrow = 4.21$, $d^\downarrow = 0.96$) соответствует высокоспиновому состоянию. Заметно меньшая величина магнитного момента по сравнению со значением $\mu = 4 \mu_B$ в ионной конфигурации d^4 указывает на сильную гибридизацию O $2p$ и Fe $3d$ -состояний.

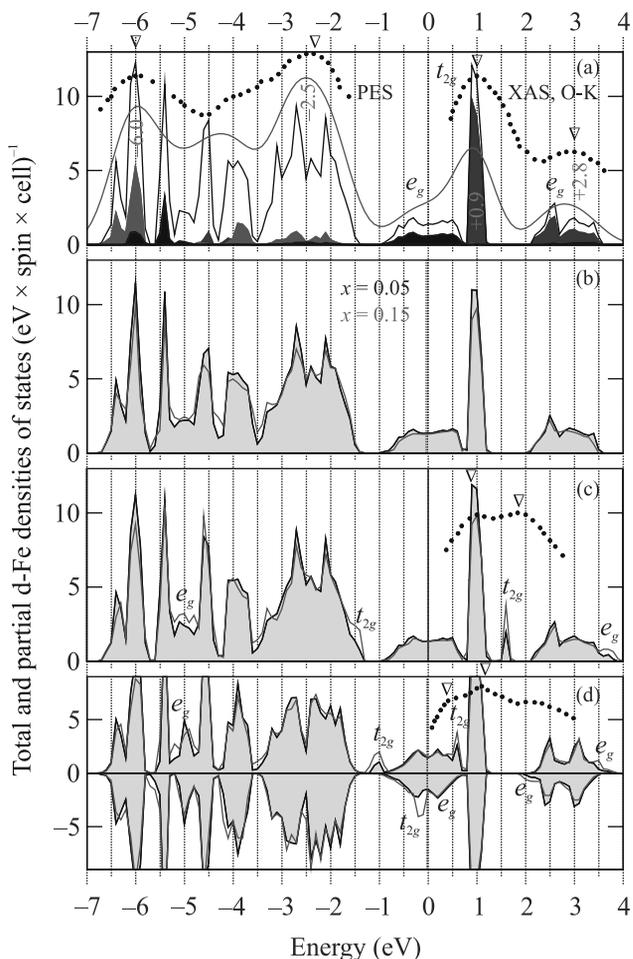


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вычисленные полные (черная и красная линии) и парциальные Fe $3d$ плотности состояний АФМ SrFeO_3 (а), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ (b), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (с) и ФМ $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ (d) твердых растворов при $x = 0.05$ и 0.15 . Экспериментальные рентгеновские спектры эмиссии (PES) и поглощения (XAS) для SrFeO_3 [33, 34], $\text{SrFe}_{0.80}\text{Mn}_{0.20}\text{O}_3$ [33] и $\text{SrFe}_{0.80}\text{Co}_{0.20}\text{O}_{3-x}$ [36] показаны точками, максимумы отмечены стрелками. Уровень Ферми показан вертикальными штриховыми линиями

Следствием этого является частичный перенос электронной плотности с кислородных лигандов на ионы железа. Таким образом, высокоспиновое состояние ионов железа в SrFeO_3 представляет суперпозицию конфигураций $d^4 + d^5L$, где L -дырка на p -оболочке кислорода, в соответствии с экспериментальными данными [13].

При легировании подрешетки железа алюминием уменьшается ширина и интенсивность основных максимумов в электронном спектре АФМ $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ (рис. 1b). При увеличении концентрации алюминия x в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ наблюдается некоторое уменьшение

плотности состояний $n(E_F)$ и смещение E_F примерно на 0.1 эВ вниз по шкале энергий, что определяется уменьшением числа валентных электронов Al и вклада s -, p -, d -состояний Al в $n(E_F)$ по сравнению с их аналогами для Fe. Понижение величины $n(E_F)$ (рис. 2) согласуется с экспериментально на-

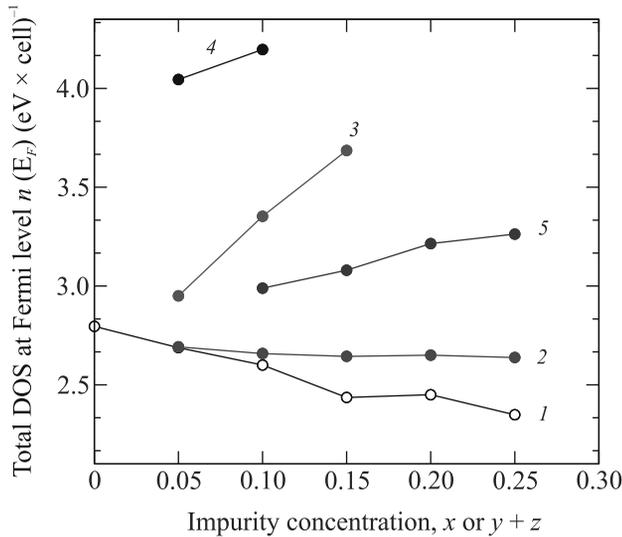


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости вычисленной полной плотности состояний на уровне Ферми, $n(E_F)$, от концентрации примесей, $0.05 \leq x \leq 0.25$, $0.10 \leq y + z \leq 0.25$, в твердых растворах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ (1), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (2), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ (3), $\text{Fe}_{1-x-0.15}\text{Al}_x\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$ (4), $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ (5)

блюдаемым уменьшением электронной проводимости в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ с ростом x [12]. Кроме того, смещение уровня Ферми в низкоэнергетическую область электронного спектра при увеличении x сопровождается частичным опустошением антисвязывающих Fe e_g^\uparrow -состояний и приводит, соответственно, к повышению прочности связи Fe-O. Данный эффект позволяет объяснить ранее обнаруженное увеличение термодинамической стабильности феррита стронция при легировании алюминием [12]. С ростом концентрации Al в интервале $x = 0.05-0.25$ расчетное значение локального магнитного момента на эффективных атомах железа $\text{Fe}^{\text{eff}} = \text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ понижается от 3.24 до $3.19 \mu_B$, рис. 3. Полная заселенность Fe^{eff} -орбиталей уменьшается от $5.15e$ до $4.98e$. В целом, можно видеть, что “легкое” легирование алюминием ($x = 0.05$) представляется вполне полезным, поскольку, с одной стороны, лишь незначительно влияет на параметры электронного транспорта, а с другой – существенно повышает устойчивость феррита в восстановительных условиях.

Твердые растворы $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ и

$\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$. На рисунке 1с приведены рассчитанные полные плотности состояний АФМ твердого раствора $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ в зависимости от содержания марганца. С ростом x в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ наблюдается формирование, рост и небольшое уширение двух пиков плотности состояний около -1.4 эВ и $+1.6$ эВ. Пик в окрестности -1.4 эВ, состоящий из антисвязывающих Mn t_{2g}^\uparrow -состояний, полностью перекрывается с валентной полосой в соответствии с экспериментом [33, 34]. Второй пик около $+1.6$ эВ образован антисвязывающими Mn t_{2g}^\downarrow -состояниями. Величина энергетической щели ~ 0.7 эВ, разделяющая Mn t_{2g}^\downarrow примесные состояния от Fe t_{2g}^\downarrow полосы проводимости, близка к экспериментальному значению ~ 1 эВ [33], рис. 1с. Вблизи энергий -4.9 эВ, $+1.14$ эВ и $+3.75$ эВ формируются более широкие полосы Mn e_g -состояний, гибридные с $2p$ -состояниями O. Вычисленный электронный спектр $\text{SrFe}_{0.85}\text{Mn}_{0.15}\text{O}_3$ хорошо совмещается с рентгеновскими спектрами поглощения и эмиссии $\text{SrFe}_{0.80}\text{Mn}_{0.20}\text{O}_3$ [33, 34]. При увеличении концентрации Mn установлено слабое уменьшение $n(E_F)$ (рис. 2), что согласуется с малым вкладом Mn e_g состояний в $n(E_F)$. Величина спинового магнитного момента $2.79 \mu_B$ на атомах марганца остается практически неизменной и близкой к значению $2.8 \mu_B$ в нелегированном SrMnO_3 , рис. 3. Таким образом,

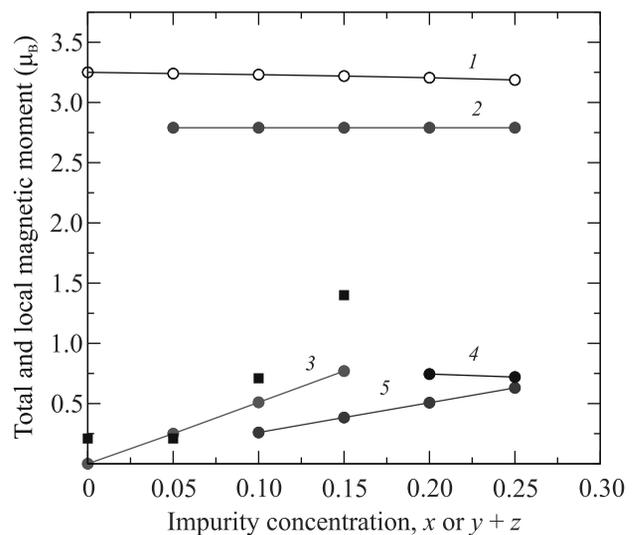


Рис. 3. (Цветной онлайн) Концентрационные ($x, y + z$) зависимости вычисленного локального/полного спинового магнитного момента (μ) в твердых растворах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ (1), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (2), $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ (3), $\text{SrFe}_{1-x-0.15}\text{Al}_x\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$ (4), $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ (5) при $0.05 \leq x \leq 0.25$, $0.10 \leq y + z \leq 0.25$. Приводятся также экспериментальные значения магнитного момента в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ (черные квадраты) [11]

вследствие незначительных изменений плотности $n(E_F)$ и локализации состояний на E_F , примесь Mn в исследованном диапазоне концентраций практически не должна влиять на уровень электронной проводимости в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$.

В отличие от марганца, замещение железа кобальтом приводит к существенным изменениям прифермиевской области электронного спектра ферримагнитного (ФМ) твердого раствора $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$. Полные плотности состояний в расчете на спин для составов $x = 0.05$ и 0.15 представлены на рис. 1d. С ростом концентрации кобальта в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ наблюдается формирование, рост и небольшое уширение узких примесных $\text{Co}(1) t_{2g}$ и $\text{Co}(2) t_{2g}$ пиков около энергий -1.0 , -0.15 и $+0.6$ эВ. Пустой пик антисвязывающих $\text{Co}(2) t_{2g}^\uparrow$ -состояний вблизи энергии 0.6 эВ частично перекрывается с $\text{Fe}(2) t_{2g}^\uparrow$ зоной проводимости в хорошем соответствии с рентгеновским спектром поглощения твердого раствора $\text{SrFe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{O}_{3-x}$ [36], рис. 1d. Главная особенность электронных спектров твердых растворов $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ заключается в формировании t_{2g}^\downarrow -пика частично заполненных антисвязывающих состояний $\text{Co}(1)$ под уровнем Ферми около энергии -0.15 эВ. Одновременно, в окрестности уровня Ферми формируются широкие полосы гибридных $\text{Co}(1) e_g - \text{O } 2p$ и $\text{Co}(2) e_g - \text{O } 2p$ -состояний. Также следует заметить, что вклад локализованных $\text{Co } t_{2g}$ -состояний в плотность $n(E_F)$ более чем в 2 раза превышает вклад делокализованных $\text{Co } e_g$ -состояний и имеет тенденцию к увеличению с ростом содержания кобальта. Существование на уровне Ферми электронных состояний, значительно отличающихся характером локализации, может приводить к анизотропии свойств [5] и наблюдаемым в эксперименте аномалиям электронной проводимости, термоэдс и др. [9, 10, 12]. Максимальная величина плотности состояний $n(E_F)$ в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ наблюдается в составе $x = 0.15$, рис. 2, вблизи перехода АФМ состояния в ФМ [9]. Расчетные значения магнитного момента на атомах $\text{Co}(1)$ и $\text{Co}(2)$ в $\text{SrFe}_{0.85}\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$ составляют -0.15 и $+3.74 \mu_B$, что соответствует низкоспиновому состоянию ионов Co^{3+} (d^6) и высокоспиновому состоянию ионов Co^{4+} (d^6L). Полученные в результате расчета значения магнитного момента согласуются с наблюдаемой в эксперименте тенденцией к росту с увеличением содержания кобальта [11], рис. 3.

Наличие частично заполненного примесного пика с максимумом несколько ниже уровня Ферми на фоне делокализованных состояний благоприятствует сочетанию высокой термоэдс и проводимости [37].

Добавка акцепторной примеси алюминия позволяет производить тонкую подстройку положения уровня Ферми в пределах примесного пика. Действительно, данные на рис. 2 показывают, что солегирование алюминием сопровождается резким увеличением плотности состояний $n(E_F)$ в результате смещения E_F в область низких энергий. При этом, плотность делокализованных $\text{Co } e_g$ -состояний остается практически неизменной. Иными словами, полученные данные показывают, что феррит $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$, модифицированный небольшими добавками алюминия, является перспективным термоэлектрическим материалом.

Твердые растворы $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$.

При легировании феррита стронция одновременно атомами Mn и Co в электронном спектре кубических ферримагнитных твердых растворов $\text{SrFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ и $\text{SrFe}_{0.75}\text{Mn}_{0.125}\text{Co}_{0.125}\text{O}_3$ наблюдается формирование дополнительных состояний Mn и Co, рис. 4. В первом приближении электронный спектр твердых растворов $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ можно рассматривать как суперпозицию спектров $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ и $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$. Положение примесных $\text{Mn } t_{2g}$, $\text{Co } t_{2g}$ и $\text{Co } e_g$ полос относительно уровня Ферми практически не изменяется. По сравнению со спектром $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ основное изменение в спектре $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ связано с уширением Mn e_g полосы, рис. 4с. Это приводит к увеличению вклада делокализованных Mn e_g -состояний в $n(E_F)$. Небольшое смещение уровня Ферми в область высоких энергий в $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ в сравнении с его положением в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ приводит к уменьшению вклада локализованных состояний Co в $n(E_F)$ и выравниванию вкладов локализованных и делокализованных состояний Co. В целом, с ростом концентрации Co и Mn в твердых растворах наблюдается тенденция роста $n(E_F)$, рис. 2. Следовательно, можно ожидать, что умеренное солегирование кобальтом и марганцем подрешетки железа должно способствовать повышению концентрации и подвижности электронных носителей в $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$.

Заключение. Впервые с использованием метода когерентного потенциала при учете разных величин кулоновских взаимодействий на t_{2g} -оболочках Mn, Fe и Co определены особенности электронных спектров и рассчитаны значения спиновых магнитных моментов в твердых растворах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-x-0.15}\text{Al}_x\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$, $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ при $0.05 \leq x \leq 0.15$, $0.05 \leq y \leq 0.125$ и $0.05 \leq z \leq 0.125$.

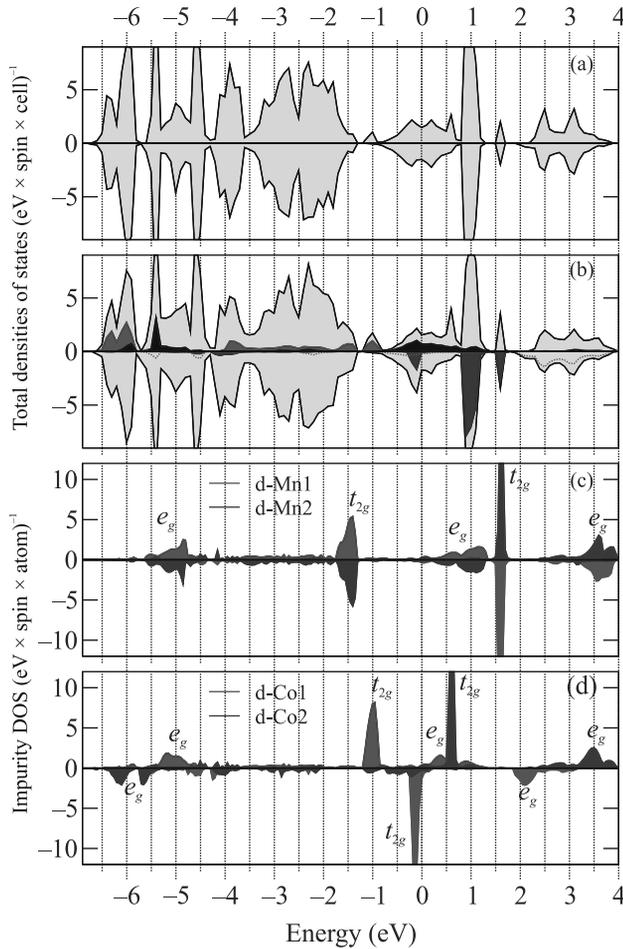


Рис. 4. (Цветной онлайн) Вычисленные полные (черная линия) плотности состояний (DOS) ФМ твердых растворов $\text{SrFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.125}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ (a) и $\text{SrFe}_{0.75}\text{Mn}_{0.125}\text{Co}_{0.125}\text{O}_3$ (b). Парциальные Fe 3d (b) и примесные Mn 3d (c) и Co 3d (d) DOS приводятся для состава при $y = z = 0.125$. Черным и красным цветом представлены состояния атома Fe t_{2g}^{\uparrow} и e_g^{\uparrow} симметрии, а синим цветом и красной пунктирной линией приводятся состояния атома Fe t_{2g}^{\downarrow} и e_g^{\downarrow} симметрии (b). Уровень Ферми показан вертикальными штриховыми линиями

Для всех исследованных соединений характерно наличие конечной плотности состояний на уровне Ферми в согласии с экспериментом. Наиболее сильное влияние на электронные и магнитные свойства оказывает примесь кобальта, приводящая к возникновению узкого частично заполненного пика Co t_{2g} -состояний непосредственно под E_F на фоне выходящей на уровень Ферми полосы Co e_g состояний. В твердых растворах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ вклад локализованных Co t_{2g} -состояний в $n(E_F)$ доминирует над вкладом делокализованных Co e_g -состояний. При увеличении концентрации Co в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$

наблюдается повышение $n(E_F)$ и μ^{tot} в соответствии с имеющимися экспериментальными данными [10, 11]. Увеличение доли локализованных состояний в $n(E_F)$ с ростом x способствует понижению подвижности электронных носителей. При этом, добавка акцепторной примеси алюминия в $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ еще более увеличивает величину $n(E_F)$ и степень локализации состояний на E_F . Таким образом, солегирование феррита стронция кобальтом и алюминием позволяет эффективно влиять как на концентрацию электронных носителей, так и степень их локализации. Сочетание данных особенностей позволяет рассматривать $\text{SrFe}_{1-x-0.15}\text{Al}_x\text{Co}_{0.15}\text{O}_3$ в качестве перспективного термоэлектрического материала. Иная ситуация наблюдается в твердых растворах $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$, где на уровне Ферми образуется полоса Mn e_g состояний, благоприятствующая увеличению доли делокализованных состояний в $n(E_F)$ и повышению подвижности электронных дырок. Максимальный вклад делокализованных состояний и относительно высокое значение плотности $n(E_F)$ позволяют идентифицировать твердые растворы $\text{SrFe}_{1-y-z}\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$, где $0.10 \leq y \leq 0.125$ и $0.10 \leq z \leq 0.125$ в качестве перспективных электродных материалов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта # 22-19-00129. Разработка методики расчетов выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (# АААА-А19-119031890028-0 (ВМЗ) и # 122021000039-4 (МАК).

1. R. J. D. Tilley, *Perovskites. Structure-property relationships*, John Wiley & Sons, Chichester (2016), p. 327.
2. J. B. Goodenough, *Localized to itinerant electronic Transition in perovskite oxides*, Springer-Verlag, Berlin, N.Y. (2001), p. 239.
3. Т. А. Шайхулов, А. Р. Сафин, К. Л. Станкевич, А. В. Матасов, М. П. Темиряева, Д. А. Винник, В. Е. Живулин, С. А. Никитов, Письма в ЖЭТФ **117**, 620 (2023).
4. A. Lebon, P. Adler, C. Bernhard, A. V. Boris, A. V. Pimenov, A. Maljuk, C. T. Lin, C. Ulrich, and B. Keimer, Phys. Rev. Lett. **92**, 037202 (2004).
5. Y. Long, Y. Kaneko, Sh. Ishiwata, Y. Taguchi, and Y. Tokura, J. Phys.: Cond. Mat. **23**, 245601 (2013).
6. N. Hayashi, T. Yamamoto, A. Kitada, A. Matsuo, K. Kindo, J. Hester, H. Kageyama, and M. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 113702 (2013).
7. S. Kamba, V. Goian, V. Skoromets, J. Hejtmanek, V. Bovtun, M. Kempa, F. Borodavka, P. Vanek,

- A. A. Belik, J. H. Lee, O. Pecherova, and K. M. Rabe, *Phys. Rev. B* **89**, 064308 (2014).
8. S. Balamurugan, K. Yamaura, A. B. Karki, D. P. Young, M. Arai, and E. Takayama-Muromachi, *Phys. Rev. B* **74**, 172406 (2006).
9. Y. W. Long, Y. Kaneko, S. Ishiwata, Y. Tokunaga, T. Matsuda, H. Wadati, Y. Tanaka, S. Shin, Y. Tokura, and Y. Taguchi, *Phys. Rev. B* **86**, 064436 (2012).
10. A. Maignan, Ch. Martin, N. Nguyen, and B. Raveau, *Solid State Sci.* **3**, 57 (2001).
11. T. Takeda, T. Watanabe, Sh. Komura, and H. Fujii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 731 (1987).
12. M. V. Patrakeev, V. V. Kharton, Yu. A. Bakhteeva, A. L. Shaula, I. A. Leonidov, V. L. Kozhevnikov, E. N. Naumovich, A. A. Yaremchenko, and F. M. B. Marques, *Solid State Sci.* **8**, 476 (2006).
13. M. Abbate, G. Zampieri, J. Okamoto, A. Fujimori, S. Kawasaki, and M. Takano, *Phys. Rev. B* **65**, 165120 (2002).
14. W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
15. L. Hedin and B. I. Lundqvist, *J. Phys. Chem.* **4**, 2064 (1971).
16. D. D. Sarma, N. Shanthi, S. R. Barman, N. Hamada, H. Sawada, and K. Terakura, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1126 (1995).
17. Zh. Yang, Zh. Huang, L. Ye, and X. Xie, *Phys. Rev. B* **60**, 15674 (1999).
18. V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czyzik, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).
19. Zh. Li, R. Laskowski, T. Iitaka, and T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **85**, 134419 (2012).
20. M. Hoffmann, V. S. Borisov, S. Ostanin, I. Mertig, W. Hergert, and A. Ernst, *Phys. Rev. B* **92**, 094427 (2015).
21. S. Chowdhury, A. Jana, A. K. Mandal, R. J. Choudhary, and D. M. Phase, *ACS Appl. Electron. Mater.* **3**, 3060 (2021).
22. H. Wu, W. Tan, Ch. Xiao, D. Huang, K. Deng, and Y. Qian, *Solid State Commun.* **151**, 1616 (2011).
23. I. Solovyev, N. Hamada, and K. Terakura, *Phys. Rev. B* **53**, 7158 (1996).
24. V. M. Zainullina, M. A. Korotin, and V. L. Kozhevnikov, *Prog. Solid State Chem.* **60**, 100284 (2020).
25. P. Soven, *Phys. Rev.* **156**, 809 (1967).
26. М. А. Коротин, Н. А. Скориков, В. М. Зайнуллина, Э. З. Курмаев, А. В. Лукоянов, В. И. Анисимов, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 884 (2011).
27. W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
28. В. М. Зайнуллина, М. А. Коротин, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 103 (2022).
29. М. А. Коротин, Н. А. Скориков, С. Л. Скорняков, А. О. Шориков, В. И. Анисимов, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 929 (2014).
30. М. А. Korotin, N. A. Skorikov, and A. O. Anokhin, *Phys. Rev. B* **526**, 14 (2017).
31. O. K. Andersen and O. Jepsen, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2571 (1984).
32. V. I. Anisimov, D. E. Kondakov, A. V. Kozhevnikov, I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, J. W. Allen, S.-K. Mo, H.-D. Kim, P. Metcalf, S. Suga, A. Sekiyama, G. Keller, I. Leonov, X. Ren, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **71**, 12511 (2005).
33. J.-S. Kang, H. J. Lee, G. Kim, D. H. Kim, B. Dabrowski, S. Kolesnik, H. Lee, J.-Y. Kim, and B. I. Min, *Phys. Rev. B* **78**, 054434 (2008).
34. D. H. Kim, H. J. Lee, B. Dabrowski, S. Kolesnik, J. Lee, B. Kim, B. I. Min, and J.-S. Kang, *Phys. Rev. B* **81**, 073101 (2010).
35. T. Takeda, S. Komura, and N. Watanabe, in *Ferrites*, ed. by H. Watanabe, S. Iida, and M. Sugimoto, Center for Academic Publ., Tokyo (1981), p. 385.
36. J. Lee, E. Ahn, Yu-S. Seo, Y. Kim, T.-Y. Jeon, J. Cho, I. Lee, and H. Jeon, *Phys. Rev. Appl.* **10**, 054035 (2018).
37. А. В. Дмитриев, И. П. Звягин, *УФН* **180**, 821 (2010).

Аномальное поведение туннельного магнетосопротивления в нанокompозитных пленочных структурах (CoFeV)_x(LiNbO₃)_{100-x}/Si ниже порога перколяции: проявления со-туннельных и обменных эффектов¹⁾

С. Н. Николаев^a, К. Ю. Черноглазов^a, А. В. Емельянов^a, А. В. Ситников^{a,c}, А. Н. Талденков^a, Т. Д. Пацаев^a,
А. Л. Васильев^a, Е. А. Ганьшина^b, В. А. Демин^a, Н. С. Аверкиев^d, А. Б. Грановский^{b,e}, В. В. Рыльков^{a,e,f 2)}

^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^bФизический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^cВоронежский государственный технический университет, 394026 Воронеж, Россия

^dФизико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

^eИнститут теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

^fФрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 141190 Фрязино, Россия

Поступила в редакцию 19 мая 2023 г.

После переработки 1 июня 2023 г.

Принята к публикации 2 июня 2023 г.

В диапазоне температур 3–250 К в полях до 14 Тл обнаружена сильно немонотонная температурная зависимость магнетосопротивления пленочных нанокompозитов (CoFeV)_x(LiNbO₃)_{100-x} при содержаниях $x \approx 40-48$ ат. % вблизи перколяционного перехода на изолирующей стороне. Магнетосопротивление имеет минимум при 40 К, резко возрастая при понижении температуры. Такое поведение магнетосопротивления объясняется сосуществованием в НК суперферромагнитных областей с обменно-связанными гранулами, отделенных областями из суперпарамагнитных гранул. При этом увеличение отрицательного магнетосопротивления при $T > 40$ К обусловлено разрушением суперферромагнитного упорядочения, а рост магнетосопротивления при $T < 40$ К связан с процессами упругого совместного туннелирования через цепочки гранул. В условиях насыщения намагниченности проявляется дополнительный отрицательный вклад, обусловленный, вероятно, эффектами квантовой интерференции. При $T < 4$ К наблюдается двухъямный характер полевой зависимости магнетосопротивления, связанный с проявлением положительного вклада, конкурирующего с отрицательным магнетосопротивлением.

DOI: 10.31857/S1234567823130104, EDN: gbzzqc

1. Введение. Магнитные гранулированные нанокompозиты (НК) металл–диэлектрик M_xD_{100-x} представляют собой массив гранул из ферромагнитного (ФМ) металла, хаотически расположенных в диэлектрической матрице [1]. В зависимости от температуры, концентрации и формы, гранулы магнитного НК могут находиться в однодоменном, суперпарамагнитном или неоднородно-магнитном состоянии, сопровождаемом формированием ниже порога перколяции суперферромагнитных (СФМ) областей с межгранульным обменным взаимодействием ФМ-типа, подобных ФМ доменам в сплошной пленке

(см. [2, 3], а также обзор [4]). Такие системы обладают многими практически важными явлениями, такими как гигантское магнетосопротивление (МС) [5, 6], аномальный эффект Холла с гигантским коэффициентом [7–9], магниторефрактивный эффект [10], усиленный магнитооптический эффект Керра [11] и др.

В наших недавних исследованиях магнитных НК (Co₄₀Fe₄₀V₂₀)_x(Al₂O₃)_{100-x} и (Co₄₀Fe₄₀V₂₀)_x(LiNbO₃)_{100-x} (для краткости сплав Co₄₀Fe₄₀V₂₀ будем обозначать как CoFeV) были обнаружены проявления эффектов СФМ упорядочения, туннельный аномальный эффект Холла, а в области относительно высоких температур не связанный с поправками слабой локализации логарифмический закон в температурной зависимости проводимости [12–15]. Кроме того, в этих

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

²⁾e-mail: vvrylkov@mail.ru; rylkov_vv@nrcki.ru

условиях в вертикальных структурах на основе НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ был обнаружен эффект многоуровневого резистивного переключения [14–16], что делает данные системы привлекательными для имитации синапсов в нейроморфных вычислительных системах [17, 18], к разработке которых в настоящее время проявляется повышенный интерес [19, 20].

Существенно, что пленочные НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ обладают необычными магнито-резонансными свойствами, объясняемыми наличием обменного взаимодействия магнитных ионов и ФМ-гранул [21]. Более того, межгранульный обмен в этом случае может значительно усиливаться [22] вследствие высокой диэлектрической проницаемости аморфной матрицы НК ($\epsilon_d \approx 50\text{--}90$ для $\alpha\text{-LiNbO}_3$ [23]); аморфность структуры была установлена ранее с помощью электронной микроскопии высокого разрешения [14, 16].

Однако, до сих пор в подобного рода НК с сильным межгранульным обменом ниже порога перколяции не было изучено поведение МС, тем более в сильных полях при температурах ниже гелиевых. Кроме того, эксперименты [12–15] проводились на НК пленках и структурах, синтезированных на аморфных ситалловых подложках. Вместе с тем более перспективной для использования в микроэлектронике являются подложки Si, которые обладают высокой теплопроводностью и являются кристаллическими, что может привести к заметным структурным изменениям синтезированных НК пленок.

В данной работе в пленках $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ на Si подложках, в отличие от типичного для НК отрицательного МС, монотонно убывающего с повышением температуры, обнаружено сильно немонотонное его температурное поведение, обусловленное, как мы полагаем, проявлением в НК ниже порога перколяции x_p эффектов совместного резонансного туннелирования [1, 24, 25] и СФМ упорядочения [2–4].

2. Образцы и методы исследований. Пленочные структуры $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}/\text{Si}$ с толщиной слоя НК ≈ 150 нм синтезированы методом ионно-лучевого распыления с использованием составной мишени из пластины литого сплава $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{V}_{20}$ с неравномерно расположенными на ней навесками оксида LiNbO_3 . Такая мишень позволяла в едином цикле синтезировать НК с различным соотношением ФМ сплава в диапазоне 10–50 ат. % (см. детали в [14, 15]). Осаждение пленок осуществлялось в атмосфере аргона ($P_{\text{Ar}} \approx 4 \cdot 10^{-4}$ Торр) со скоростью около 15 нм/мин с добавлением в процессе роста кислоро-

да в режиме заданного потока (парциальное давление $P_{\text{O}_2} \approx 8 \cdot 10^{-6}$ Торр) без использования принудительного охлаждения подложкодержателя. Перед осаждением подложки подвергались очистке ионами аргона (время 15–20 с, энергия 2 кВ).

Транспортные и магнитные свойства НК изучались на универсальных образцах, выполненных с использованием взрывной (lift-off) фотолитографии в форме двойного холловского креста шириной проводящего канала $w = 1.2$ мм и расстоянием между потенциальными зондами $l = 1.4$ мм на боковых гранях [14]. Исследования проводимости, МС и намагниченности выполнялись с помощью универсальной измерительной системы PPMS Dynacool-14 в температурном диапазоне $T = 3\text{--}200$ К в магнитных полях до 14 Тл. При исследованиях МС точность измерения сопротивления была не менее 0.1 %. Прецизионные измерения намагниченности выполнялись с помощью СКВИД магнитометра Quantum Design MPMS-XL7.

Для исследования структурных особенностей НК образцов были приготовлены их поперечные сечения с помощью сфокусированного ионного пучка (ФИП) Ga^+ в электронно-ионном микроскопе “Helios NanoLabtm 600i” (Thermo Fisher Scientific, США). Изображения высокого разрешения были получены при ускоряющем напряжении 200 кэВ с помощью просвечивающего/растрового электронного микроскопа (ПЭМ/ПРЭМ) “Теснаи Osiris” (Thermo Fisher Scientific, США), снабженного энергодисперсионным рентгеновским спектрометром (ЭРС) “Super-X” (Bruker, США) и высокоугловым кольцевым темнопольным детектором (ВКТД) (Fischione, США).

3. Результаты и обсуждение. Согласно данным электронной микроскопии пленки НК представляют собой ансамбль хаотично расположенных CoFeB гранул размером $a_g \approx 2.5\text{--}4$ нм в матрице LiNbO_y . При этом вытянутость гранул в направлении нормали к пленке (отношение поперечного размера гранул к их латеральному размеру) в среднем составляла около 1.5, что существенно меньше, чем в случае пленок НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, полученных на ситалле, где этот параметр достигал 4–5 [14]. Другое важное отличие заключается в том, что ранее методами высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ) мы наблюдали кристалличность отдельных гранул CoFeB в ОЦК структуре с постоянной элементарной ячейки $a_c = 0.284$ нм [14]. Однако, в исследованных НК пленках подобные наблюдения оказались затруднительными, что указывает на заметно большее содержание в гранулах атомов

бора, способствующего их аморфизации [26]. Результаты ВРЭМ также показали, что пленка НК была отделена от подложки Si тонким переходным слоем SiO_x толщиной ≈ 10 нм (см. дополнительные материалы).

При исследованиях температурных зависимостей удельного сопротивления $\rho(T)$ в области относительно высоких температур было выявлено сильное его уменьшение при $T \geq 300$ К (см. вставку к рис. 1), свидетельствующее о шунтирующем влиянии Si под-

ложки на ситалловых и Si подложках, было показано, что при температурах ниже 250 К шунтирующее влияние Si подложки практически полностью подавляется. Поэтому далее представлены результаты исследования транспортных свойств НК пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ при $T \leq 250$ К.

На рисунке 1 приведены температурные зависимости проводимости $\sigma(T)$ в координатах $\sigma - \log T$ (рис. 1a) и $\ln \sigma - (1/T)^{1/2}$ (рис. 1b) для образцов НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с различным содержанием ФМ сплава ($x = 40-48$ ат. %) (кривые 1-5). Для НК с содержанием металла $x \approx 44-48$ ат. % температурная зависимость проводимости σ в широком диапазоне температур ($T \approx 10-110$ К) хорошо описывается логарифмической функцией: $\sigma = \sigma^* + \beta \cdot \ln T$, где σ^* и β – параметры. В [27] (см. также обзор [1]) показано, что такого рода зависимость может наблюдаться в гранулированной системе ниже порога x_p при туннельном контакте между соседними гранулами G_t , заметно превышающем квант проводимости: $g = G_t/(2e^2/h) \geq 1$. Логарифмический закон в проводимости не связан с поправками за счет слабой локализации, а объясняется перенормировкой кулоновского взаимодействия [1]. Поэтому для его наблюдения температура не должна быть слишком низкой и высокой: $gd \ll k_B T \ll E_c$, где $\delta = (vV)^{-1}$ – средний энергетический зазор между уровнями размерного квантования в грануле, $V = \pi a_g^3/6$, v – плотность состояний на уровне Ферми, k_B – постоянная Больцмана, $E_c = e^2/(\epsilon_d \cdot a_g)$ – зарядовая энергия (кулоновской блокады) отдельной гранулы. Полагая $\epsilon_d \approx 50$ (как для $\alpha\text{-LiNbO}_3$ на частотах 0.1–1 МГц [23]), при среднем размере гранул $a_g \approx 3$ нм получим $E_c/k_B \approx 110$ К, что хорошо согласуется с верхней температурой наблюдения закона $\sigma(T) \propto \ln T$ (см. рис. 1a). Параметр β определяется радиусом корреляции перколяционной сетки L [12, 14]: $\beta \sim 2e^2 a/\hbar \pi k L^2$, где k – эффективное число контактов гранулы с ближайшими соседями. Найденный из эксперимента для образца с $x \approx 48$ ат. % параметр $b \approx 14$ (Ом·см) $^{-1}$ и занимает промежуточное значение между сильно вытянутыми и округлыми гранулами $\beta \approx 6$ и 30 (Ом·см) $^{-1}$, соответственно [14].

При содержании металлических гранул ниже некоторой критической величины x_c безразмерный кондуктанс g оказывается меньше 1. В этих условиях согласно [1] происходит переход металл-изолятор (ПМИ), ниже которого наблюдается закон Эфроса–Шкловского “1/2”: $\ln \sigma \propto -(T_0/T)^{1/2}$, обусловленный совместным туннелированием (или со-туннелированием от англ. *co-tunneling*) электронов через цепочки “резонансных” гранул. В этих

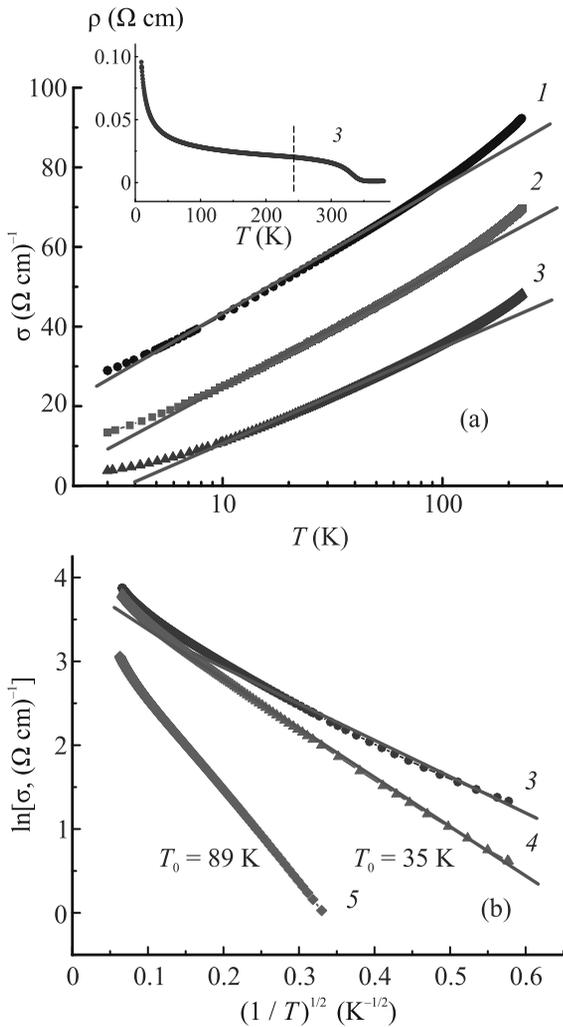


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости проводимости НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ $\sigma(T)$ в координатах: (a) – $\log T$; (b) – $\ln \sigma - (1/T)^{1/2}$. Зависимости получены для образцов с различным содержанием ФМ сплава (кривые 1–5): 1 – 48; 2 – 46; 3 – 44; 4 – 42; 5 – 40 ат. %

ложки из-за недостаточно хороших изолирующих свойств сформированного поверхностного слоя SiO_x . Из сравнения зависимостей $\rho(T)$ пленок НК, полу-

условиях существенно снижается энергия активации прыжка в сравнении с энергией кулоновской блокады изолированной гранулы E_c , причем тем сильнее, чем больше гранул в резонансной цепочке. При этом параметр T_0 увеличивается с уменьшением x из-за уменьшения длины локализации электрона на гранулах.

Описанный переход к закону “1/2” хорошо наблюдается и в нашем случае (см. рис. 1b). Параметр T_0 достаточно резко увеличивается с уменьшением x , более чем в 2 раза при уменьшении x от 42 к 40 ат. %. При этом образец с $x \approx 44$ ат. % оказывается пограничным и одинаково хорошо “на глаз” описывается законом $\sigma(T) \propto \ln T$ (при относительно высоких температурах, рис. 1a) и законом $\ln \sigma \propto -(T_0/T)^{1/2}$ (при относительно низких температурах, рис. 1b). Отметим, что вероятной причиной подъема в зависимости $\ln \sigma$ от $(1/T)^{1/2}$, наблюдаемого при высоких температурах (малых $1/T^{1/2}$; рис. 1b) в образцах с $x \approx 44$ и 42 ат. % является переход в прыжковой проводимости от режима со-туннелирования электронов через цепочки “резонансных” гранул к режиму прыжка на ближайшего соседа, что обусловлено небольшой величиной T_0 в этих образцах [1].

На рисунке 2 представлены в нормированном виде зависимости продольного удельного сопротивления $\rho(B)/\rho(0)$ от магнитного поля для образца $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с $x \approx 44$ ат. % при различных температурах в диапазоне $T = 3-200$ К. Можно выделить три температурные области, в которых поведение величины магниторезистивного эффекта $M_R[\%] = 100 \cdot [\rho(B)/\rho(0) - 1]$ кардинально отличаются друг от друга. Высокотемпературная область (ВТ) $T \approx 50-200$ К (рис. 2a), в которой величина $|M_R|$ падает с уменьшением температуры, хотя обычно в наногранулированных системах этот эффект растет [28, 29]. Для сравнения на рис. 2a показана также зависимость отношения $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 10$ К, которое в поле 14 Тл совпадает с величиной $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 200$ К.

В области промежуточных температур (ПТ) $T \approx 6-40$ К тенденция в поведении МС изменяется на противоположную (рис. 2b) – в этой области абсолютное значение M_R резко увеличивается с понижением температуры: от 0.44 % при $T = 40$ К до 2.0 % при $T = 6$ К. Ранее значительное увеличение МС эффекта при $T \leq 40$ К наблюдалось в НК Co-Al-O, которое было описано в рамках спин-зависимых процессов со-туннелирования [24]. В нашем случае, однако, начинает заметно проявляться вклад в отрицательном МС, не насыщающийся в поле до 14 Тл, что указывает на его не магнитную (спин-зависимую) природу

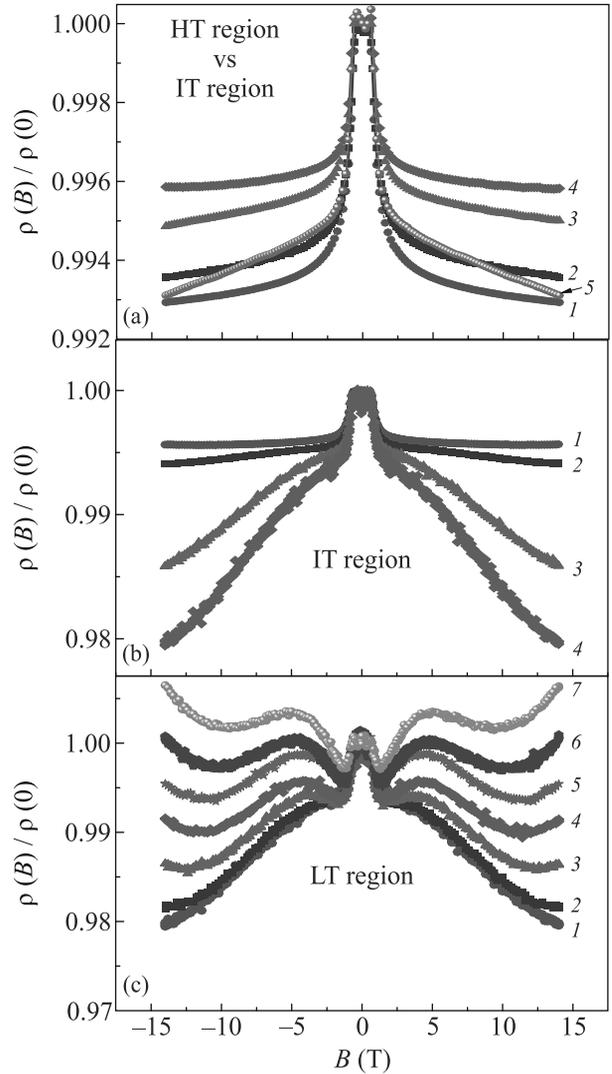


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости нормированного продольного удельного сопротивления $\rho(B)/\rho(0)$ от магнитного поля при различных температурах для образца $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с $x \approx 44$ ат. % в трех областях. (a) – ВТ область $T \approx 50-200$ К (НТ), в которой величина отрицательного МС падает с уменьшением температуры (кривые 1–5): 1 – 200; 2 – 160; 3 – 100; 4 – 50; 5 – 10 К. Для сравнения на рисунке показана зависимость отношения $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 10$ К, которое в поле 14 Тл совпадает с величиной $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 200$ К. (b) – Область ПТ $T \approx 6-40$ К (ИТ), в которой величина МС резко увеличивается с понижением температуры (кривые 1–6): 1 – 40; 2 – 20; 3 – 10; 4 – 6 К. (c) – Область низких температур $T \approx 3-6$ К (ЛТ), где наблюдается переход к положительному МС, сопровождаемый проявлением двух минимумов в зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ (кривые 1–7): 1 – 6.0; 2 – 4.5; 3 – 3.8; 4 – 3.4; 5 – 3.3; 6 – 3.0; 7 – 2.8 К. Поле в экспериментах направлено перпендикулярно плоскости пленки НК

ду. Подтверждением тому являются результаты по изучению корреляции в изменении M_R и намагниченности M на примере образца с $x \approx 44$ ат. % при варьировании температуры от 5 до 10 К (рис. 3а). Из данных рис. 3а следует, что как сама величина M , так и ее изменение $\Delta M = M(5 \text{ К}) - M(10 \text{ К})$ насыщаются в полях $\mu_0 H \geq 1.5$ Тл. При этом, однако, величина изменения МС $\Delta M_R(B) = 100 \cdot [\rho(B, 10 \text{ К}) - \rho(B, 6 \text{ К})]/\rho(0)$ испытывает рост с увеличением B вплоть до 14 Тл (верхняя вставка рис. 3а). Иными словами, в сильных полях отсутствует корреляция в поведении M_R и M .

Наконец, необычная модификация кривых МС наблюдается при дальнейшем понижении температуры при $T \leq 6$ К (ЛТ область; рис. 2с). Ниже 4 К в зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ начинают проявляться два минимума, причем тем ярче, чем ниже температура. Насколько нам известно, ранее подобное двухъямное поведение МС было обнаружено в сильно легированном (до вырождения) компенсированном полупроводнике InSb, где оно объяснялось суперпозицией двух вкладов в МС разных знаков — отрицательного и положительного [30]. Если двухъямный характер МС в нашем случае связывать с проявлением положительного МС, то его относительный вклад максимален в образце с промежуточным содержанием $x \approx 44$ ат. %, что вытекает из данных рис. 3б, где представлены для сравнения зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ при $T \approx 3$ и 4 К для образцов с $x \approx 42, 44$ и 48 ат. %. Изменение величины M_R в поле $B = 14$ Тл для этих образцов при увеличении температуры от 3 до 4 К $\Delta M_R = 100 \cdot [\rho(B, 3 \text{ К}) - \rho(B, 4 \text{ К})]/\rho(0)$ составляет: 1.3, 2 и 0.9 %, соответственно. В образце с наименьшим содержанием $x \approx 40$ ат. % при $T = 4$ К положительный вклад в МС практически не проявляется. При этом $\rho(B)/\rho(0)$ в сильных полях описывается корневым законом, $\Delta\rho(B)/\rho(0) \propto -B^{1/2}$, который, например, может наблюдаться в немагнитных неупорядоченных системах в режиме прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка (*variable-range-hopping or VRH regime*) [31]. Заметим, что сильно немономонное полевое поведение МС недавно наблюдалось в антиферромагнетике типа RB12 с сильными электронными корреляциями (см. рис. 2 в [32]). Однако, в этом случае в полях $B \leq 1$ Тл МС является положительным и при низких температурах не изменяет свой знак с ростом B .

Рассмотренное выше на примере образца с $x \approx 44$ ат. % температурное поведение эффекта МС наблюдается для всех образцов из диапазона $x \approx 40-48$ ат. % (рис. 4а). Во всех случаях минимальная величина $|M_R|$ наблюдается при $T_{\min} \sim 40$ К, при

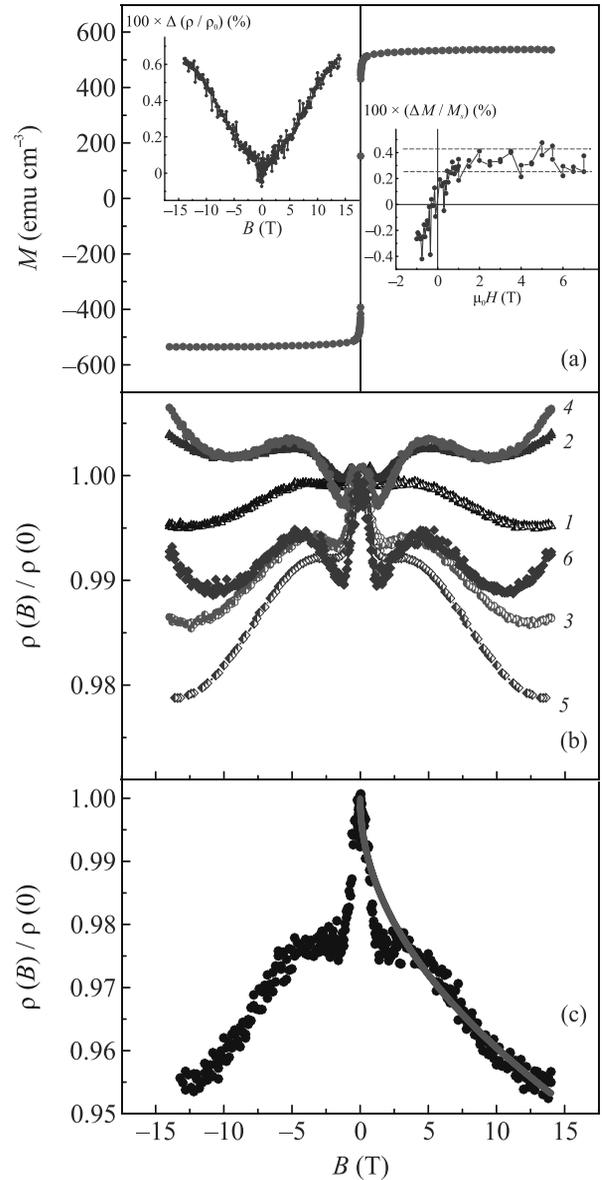


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Магнитополевая зависимость намагниченности в образце с $x = 44$ ат. % при $T = 5$ К. На вставке справа показана зависимость приращения намагниченности $\Delta M(H)/M_s$ от магнитного поля при уменьшении T от 10 до 5 К, измеренная с помощью СКВИД магнетометра (M_s – намагниченность насыщения). На вставке слева – зависимость изменения отношения $\Delta\rho(B)/\rho(0)$ от магнитного поля также при уменьшении T от 10 до 6 К. (б) – Сравнительные зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ для образцов с различным содержанием металла $x = 48$ (кривые 1 и 2), 44 (кривые 3 и 4) и 42 ат. % (кривые 5 и 6) при $T = 4.0$ (кривые 1, 3, 5) и 3.0 К (кривые 2, 4, 6). (с) – Зависимость $\rho(B)/\rho(0)$ для образца с $x = 40$ ат. % при $T = 4.0$ К. Сплошная линия – результат подгонки корневой зависимостью: $\Delta\rho(B)/\rho(0) = 1 - 0.0125 \cdot B^{1/2}$ [Тл]

этом наиболее сильный рост МС при уменьшении T от 40 до 6 К (более, чем в 4 раза) достигается в образце с наименьшим значением $x \approx 40$ ат. %.

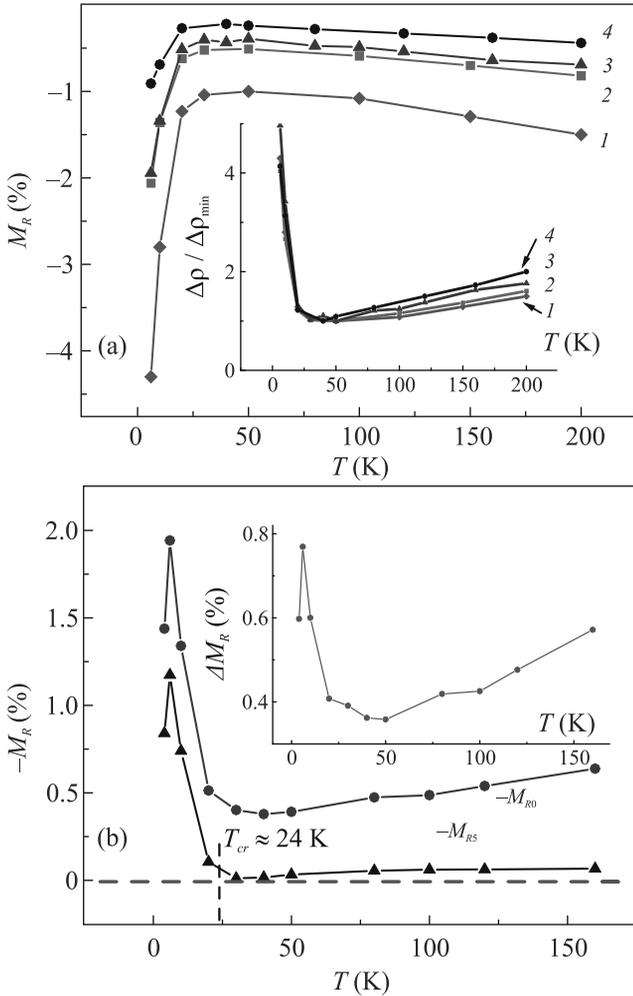


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости МС от температуры в диапазоне $T = 6–200$ К для образцов с различным содержанием металла (кривые 1–4): 1 – 40; 2 – 42; 3 – 44; 4 – 48 ат. %; $M_R = 100 \cdot [\rho(14 \text{ Тл}) - \rho(0)]/\rho(0) = 100 \cdot \Delta\rho/\rho_0$. На вставке – температурные зависимости $\Delta\rho/\rho_{\min}$ для тех же образцов ($|\Delta\rho_{\min}|$ – минимальное значение $|\Delta\rho|$ при изменении поля от 0 до 14 Тл). (б) – Инвертированные температурные зависимости МС для образца с $x \approx 44$ ат. %, полученные в сильных полях при его изменении от 5 до 14 Тл: $M_{R5} = 100 \cdot [\rho(14 \text{ Тл}) - \rho(5 \text{ Тл})]/\rho(5 \text{ Тл})$, а также при изменении поля от 0 до 14 Тл (M_{R0}). На вставке – температурная зависимость: $\Delta M_R = (M_{R5} - M_{R0})$

Интересно проанализировать температурное поведение МС для образцов с разным x в нормированном виде: $f(T) = \Delta\rho(T)/\Delta\rho_{\min}$, где $|\Delta\rho_{\min}|$ – минимальное значение $|\Delta\rho|$ при изменении поля от 0 до 14 Тл при $T_{\min} \approx 40$ К. Представленные на вставке

рис. 4а данные по зависимостям $f(T)$ ясно показывают, что относительный рост $f(T)$ с увеличением температуры (в диапазоне $40 < T < 200$ К) максимален для образца с наибольшим $x \approx 48$ ат. % и достигает 2 раз.

Столь необычная зависимость $f(T)$ наводит на мысль о сосуществовании в НК пленках СФМ областей (с обменно-связанными гранулами), которые не образуют бесконечного перколяционного кластера и отделены друг от друга областями из слабо взаимодействующих суперпарамагнитных гранул (рис. 5а).

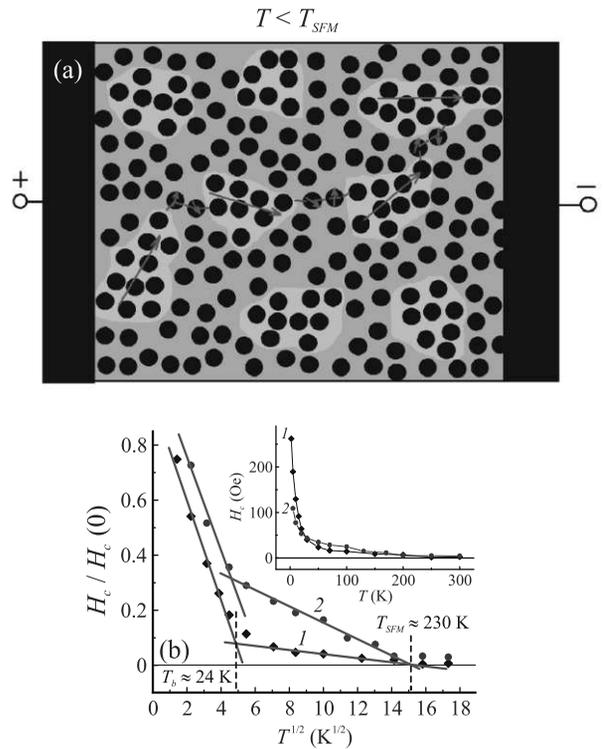


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Нанокomпозитная перколяционная система с фазовым магнитным расслоением на обменно-связанные гранулированные области и области с преимущественным диполь-дипольным взаимодействием между гранулами. Розовым цветом выделены обменно-связанные области, определяющие путь электронного протекания. Стрелками изображены магнитные моменты областей и гранул. (б) – Нормированные зависимости коэрцитивной силы $H_c/H_c(0)$ от $T^{1/2}$ для образцов с $x = 44$ (кривая 1) и 48 ат. % (кривая 2), подтверждающие наличие областей с высокими эффективными температурами Кюри $T_{SFM} \approx 230$ К. $H_c(0)$ – величина коэрцитивного поля при $T \rightarrow 0$. На вставке – зависимости $H_c(T)$ для тех же образцов

При этом увеличение отрицательного МС при $T > 40$ К естественно связать с разрушением магнитного упорядочения в СФМ областях, которое тем силь-

нее должно проявляться, чем ближе температура к температуре перехода областей из СФМ в суперпарамагнитное состояние T_{SFM} [3, 33]. При низких температурах, заметно меньших T_{SFM} , когда магнитные моменты гранул в SFM областях ориентированы почти одинаково, данный вклад в МС полностью поддается [3, 33].

Причины резкого увеличения МС при низких $T < 40$ К заставляют предположить, что СФМ области не являются связанными, а отделены друг от друга областями из “изолированных” гранул с прыжковым характером транспорта электронов, который в нашем случае описывается закон “1/2” (рис. 1b), наблюдаемым при доминировании процессов резонансного со-туннелирования [1]. В этих условиях, как предсказано в [25], возможно резкое увеличение отрицательного МС интерференционной природы, возникающего с понижением температуры при переходе от режима неупругого резонансного со-туннелирования к режиму упругого. Данный переход характеризуется критической температурой [25]:

$$T_{cr} \sim \Lambda^{-1} (\delta E_c)^{1/2} \propto 1/a_g^2, \quad (1)$$

где $\Lambda \sim 10$ – логарифмический фактор. В [25] для гранул Al размером $a_g \sim 10$ нм получена оценка $T_{cr} \sim 2$ К. В нашем случае средний размер гранул $a_g \approx 3$ нм. Поэтому при прочих равных условиях из (1) следует, что величина T_{cr} в исследованных НК должна быть на порядок выше, т.е. $T_{cr} \sim 20$ К.

Для оценки значения T_{cr} из эксперимента следует проанализировать поведение МС, найденного из изменения сопротивления в сильных полях в условиях насыщения намагниченности. На рисунке 4b показана в инвертированном виде температурная зависимость МС для образца с $x \approx 44$ ат. %, полученная в сильных полях при его изменении от 5 до 14 Тл: $M_{R5}(T) = 100 \cdot [\rho(14 \text{ Тл}) - \rho(5 \text{ Тл})] / \rho(5 \text{ Тл})$. Там же для сравнения представлена зависимость $M_{R0}(T)$, найденная при изменении поля от 0 до 14 Тл, а также на вставке – температурная зависимость разницы: $\Delta M_R = (M_{R5} - M_{R0})$. Из приведенных данных следует, что высокополевое МС практически не наблюдается при $T > 24$ К ($M_{R5} < 0.1\%$) и резко увеличивается ниже температуры $T \approx 24$ К, которая совпадает с приведенной выше оценкой $T_{cr} \sim 20$ К. Отметим, что ΔM_R , зависящее от намагниченности, растет как выше, так и ниже $T_{\min} \sim 40$ К. При этом увеличение ΔM_R при $T < 40$ К достигает ≈ 2 раз, как в условиях спин-зависимого электронного со-туннелирования, обнаруженного в гранулированных пленках Co-Al-O в [24].

Иными словами, данные представленные на рис. 3а и 4 убедительно свидетельствуют о наличии в изученных НК существенного вклада в отрицательное МС, который не связан с магнитным состоянием системы и, скорее всего, обусловлен эффектами квантовой интерференции при переходе от режима неупругого к режиму упругого со-туннелирования [25]. Отметим также, что в этом случае в сильных полях также ожидается корневая зависимость МС от поля: $\Delta \rho(B) / \rho(0) \propto -B^{1/2}$ [25], как в VRH режиме [31], что наблюдается в эксперименте (рис. 3с).

В основе объяснения наблюдения минимума в температурном поведении эффекта МС лежат представления о магнитном фазовом расслоении НК системы на обменно-связанные гранулированные СФМ области и области с преимущественным диполь-дипольным взаимодействием между гранулами (рис. 5а). Известно, что в этих условиях в НК системе существенно модифицируется закон Нееля-Броуна, описывающий температурное поведение коэрцитивного поля H_c [34, 35]. В этом случае в зависимости H_c от \sqrt{T} при некотором значении $T_b^* \approx T_b$ наблюдается излом, после которого H_c следует с ростом T по тому же закону, $H_c(T) \propto -\sqrt{T}$, но с меньшим наклоном вплоть до пересечения с осью абсцисс ($H_c = 0$) при $T \approx T_{SFM}$. (Здесь T_b – температура блокировки гранул в отсутствие взаимодействия.) Такое поведение, действительно, наблюдается в нашем случае (см. рис. 5b). Найденная по особенностям зависимости H_c от \sqrt{T} температура блокирования $T_b \approx 24$ К, а величина $T_{SFM} \approx 230$ К. Заметим, что полученное значение T_b хорошо совпадает с данными прямых измерений этой величины по изменению магнитного момента образцов с малым содержанием металла при их нагреве в слабом поле 10 мТл после охлаждения в нулевом поле (ZFC кривые). При $x \approx 17$ ат. % наблюдается максимум в ZFC кривых, который дает параметр $T_b \approx 25$ К (в условиях межгранульного взаимодействия при $x \approx 42$ ат. % максимум сильно размывается $T_b \approx 20$ –80 К; см. дополнительные материалы).

Рассмотрим теперь подробнее особенности поведения МС в низкотемпературной области ($T \leq 6$ К), где проявляется два минимума в зависимости $\rho(B) / \rho(0)$ (рис. 2 и 3). Как уже отмечалось, двухъямный характер поведения МС может быть обусловлен аддитивным проявлением двух магниторезистивных вкладов с противоположными знаками – отрицательным и положительным [30]. В случае НК при $x \leq x_p$, как было недавно обнаружено нами, может наблю-

даться относительно небольшой линейный положительный вклад в МС величиной до $\sim 2 \cdot 10^{-2} \%$ /Тл при 65 К, который был описан влиянием эффекта Зеемана на высоту туннельного барьера из-за линейного по полю уменьшения энергии Ферми в гранулах [36, 37]. Согласно [36] этот вклад увеличивается с уменьшением температуры: $M_R \propto T^{-1/2}$. Иными словами, величина положительного МС при $T \sim 3$ К может достигать $M_R \sim 10^{-1} \%$ /Тл. Для проверки гипотезы о проявлении положительного вклада в МС мы прибавили к кривой отрицательного МС, наблюдаемого для образца с $x \approx 44$ ат. % при повышенной температуре $T = 4.5$ К (рис. 6), линейный поло-

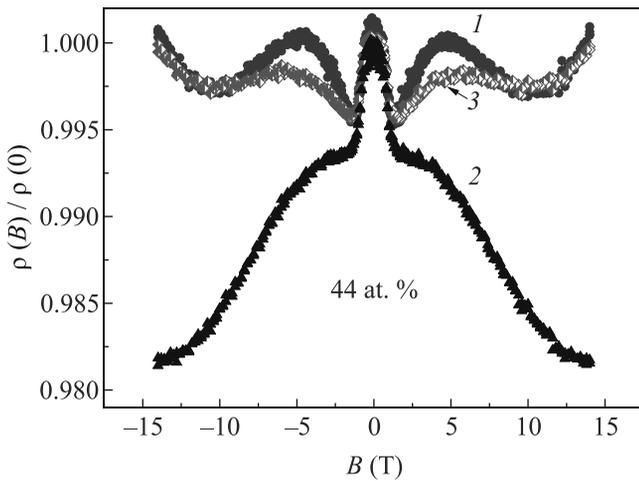


Рис. 6. (Цветной онлайн) Экспериментальные зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ для образца с $x = 44$ ат. % при $T = 3$ и 4.5 К (кривые 1 и 2). Для сравнения также показана расчетная зависимость $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 3.0$ К (кривая 3), полученная путем добавления к экспериментальной зависимости $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 4.5$ К линейного положительного вклада $\rho(B)/\rho(0) = 0.0013 \cdot B$ [Тл]

жительный член $\rho(B)/\rho(0) = c \cdot B$. При $c = 1.3 \cdot 10^{-1} \%$ /Тл экспериментальная кривая $\rho(B)/\rho(0)$ при $T = 3$ К довольно хорошо описывается полученной таким образом зависимостью: $\rho(B, 3 \text{ К})/\rho(0) \approx (B, 4.5 \text{ К})/\rho(0) + 1.3 \cdot 10^{-3} \cdot B$ (рис. 6). Использование нелинейного по полю положительного вклада (квадратичного или корневого типа) приводит к заметно худшему описанию двухъямного МС, наблюдаемого нами при $T \leq 4$ К (рис. 2с, 3б и 6). И хотя предложенное объяснение двухъямного МС представляется разумным, необходимо отметить, что для его наблюдения необходимо, чтобы линейный положительный вклад в МС резко возрастал ниже 4 К, причем не степенным (корневым) образом, как следует из [36]. Механизм сильного возрастания поло-

жительного МС пока не ясен. Возможно, это связано с аномальным поведением теплового коэффициента расширения Si, который при $T \leq 150$ К оказывается отрицательным, а затем ниже $T \leq 10$ К становится снова положительным, т.е. подложка резко сжимается (см. [38] и ссылки там).

Таким образом, обнаруженное в наноконструктивных пленочных структурах $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}/\text{Si}$ ниже порога перколяции проявление различных вкладов в магниторезистивном эффекте не противоречивым образом объясняется магнитным фазовым расслоением НК системы на обменно-связанные СФМ гранулированные области и области с преимущественным диполь-дипольным (антиферромагнитным) взаимодействием между гранулами. Одна из существенных причин, обуславливающих формирование СФМ областей, может быть связана с высокой диэлектрической проницаемостью матрицы ($\epsilon_d \sim 50$), усиливающей межгранульное обменное взаимодействие [22], влияние которого ослабляется с повышением температуры и приводит к проявлению отрицательного МС [3, 33]. С другой стороны, аморфизирующее влияние бора в гранулах CoFeB может способствовать уменьшению в них плотности состояний на уровне Ферми и облегчать переход к упругому со-туннелированию, приводя при $T \leq 20$ К к сильному увеличению отрицательного МС с понижением температуры [25], впервые обнаруженному в данной работе. При $T \leq 4$ К выявлено также положительное линейное МС типа описанного в [36], причины резкого возникновения которого пока до конца не ясны и требуют дальнейших исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 22-19-00171) в части исследования МС.

Данные по структуре пленок получены с использованием оборудования Ресурсного Центра НИЦ “Курчатовский Институт”.

1. I. S. Beloborodov, A. V. Lopatin, V. M. Vinokur, and K. B. Efetov, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 469 (2007).
2. S. Bedanta, T. Eimuller, W. Kleemann, J. Rhensius, F. Stromberg, E. Amaladass, S. Cardoso, and P. P. Freitas, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176601 (2007).
3. I. S. Beloborodov, A. Glatz, and V. M. Vinokur, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 066602 (2007).
4. S. Bedanta and W. Kleemann, *J. Phys. D* **42**, 013001 (2009).
5. A. Milner, A. Gerber, B. Groisman, M. Karpovsky, and A. Gladkikh, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 475 (1996).

6. N. Kobayashi, S. Ohnuma, T. Masumoto, and H. Fujimori, *J. Appl. Phys.* **90**, 4159 (2001).
7. A. Pakhomov, X. Yan, and B. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3497 (1995).
8. Б. А. Аронзон, Д. Ю. Ковалев, А. Н. Лагарьков, Е. З. Мейлихов, В. В. Рыльков, М. В. Седова, N. Negre, M. Goiran, and J. Leotin, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 87 (1999).
9. Б. А. Аронзон, А. Б. Грановский, Д. Ю. Ковалев, Е. З. Мейлихов, В. В. Рыльков, М. А. Седова, *Письма в ЖЭТФ* **71**, 687 (2000).
10. А. Б. Грановский, И. В. Быков, Е. А. Ганьшина, В. С. Гуцин, М. Инуе, Ю. Е. Калинин, А. А. Козлов, А. Н. Юрасов, *ЖЭТФ* **123**, 1256 (2003).
11. Е. А. Ганьшина, М. В. Вашук, А. Н. Виноградов, А. Б. Грановский, В. С. Гуцин, П. Н. Щербак, Ю. Е. Калинин, А. В. Ситников, Ч. О. Ким, Ч. Г. Ким, *ЖЭТФ* **125**, 1172 (2004).
12. V. V. Rylkov, S. N. Nikolaev, K. Yu. Chernoglazov, V. A. Demin, A. V. Sitnikov, M. Yu. Presnyakov, A. L. Vasiliev, N. S. Perov, A. S. Vedeneev, Yu. E. Kalinin, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, *Phys. Rev. B* **95**, 144202 (2017).
13. V. V. Rylkov, A. V. Sitnikov, S. N. Nikolaev, V. A. Demin, A. N. Taldenkov, M. Yu. Presnyakov, A. V. Emelyanov, A. L. Vasiliev, Yu. E. Kalinin, A. S. Bugaev, V. V. Tugushev, A. B. Granovsky, *J. Magn. Magn. Mater.* **459**, 197 (2018).
14. В. В. Рыльков, С. Н. Николаев, В. А. Демин и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **153**, 424 (2018).
15. В. В. Рыльков, А. В. Емельянов, С. Н. Николаев, К. Э. Никируй, А. В. Ситников, Е. А. Фадеев, В. А. Демин, А. Б. Грановский, *ЖЭТФ* **158**, 164 (2020).
16. M. N. Martyshov, A. V. Emelyanov, V. A. Demin et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Appl.* **14**, 034016 (2020).
17. A. V. Emelyanov, K. E. Nikiruy, A. V. Serenko, A. V. Sitnikov, M. Yu. Presnyakov, R. B. Rybka, A. G. Sboev, V. V. Rylkov, P. K. Kashkarov, M. V. Kovalchuk, and V. A. Demin, *Nanotechnology* **31**, 045201 (2020).
18. A. N. Matsukatova, A. I. Piyasov, K. E. Nikiruy, E. V. Kukueva, A. L. Vasiliev, B. V. Goncharov, A. V. Sitnikov, M. L. Znaveskin, A. S. Bugaev, V. A. Demin, V. V. Rylkov, and A. V. Emelyanov, *Nanomaterials* **12**, 3455 (2022).
19. W. Huang, X. Xia, C. Zhu, P. Steichen, W. Quan, W. Mao, J. Yang, L. Chu, and X. Li, *Nano-Micro Lett.* **13**, 85 (2021).
20. M. Lanza, A. Sebastian, W. D. Lu, M. L. Gallo, M.-F. Chang, D. Akinwande, F. M. Puglisi, H. N. Alshareef, M. Liu, and J. B. Roldan, *Science* **376**, 1066 (2022).
21. А. Б. Дровосеков, Н. М. Крейнс, О. А. Ковалев, А. В. Ситников, С. Н. Николаев, В. В. Рыльков, *ЖЭТФ* **162**, 426 (2022).
22. O. G. Udalov and I. S. Beloborodov, *Phys. Rev. B* **95**, 045427 (2017).
23. T. Mitsuyu and K. Wasa, *Jpn. J. Appl. Phys.* **20**, L48 (1981).
24. S. Mitani, S. Takahashi, K. Takanashi, K. Yakushiji, S. Maekawa, and H. Fujimori, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2799 (1998).
25. M. V. Feigel'man and A. S. Ioselevich, *JETP Lett.* **81**, 227 (2005).
26. G. V. Swamy, H. Pandey, A. K. Srivastava, M. K. Dalai, K. K. Maurya, Rashmi, and R. K. Rakshit, *AIP Adv.* **3**, 072129 (2013).
27. K. B. Efetov and A. Tschersich, *Phys. Rev. B* **67**, 174205 (2003).
28. J. Inoue and S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **53**, R11929 (1996).
29. X. Batlle and A. Labarta, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35**, R15 (2002).
30. Б. А. Аронзон, Н. К. Чумаков, Т. Дитл, И. Врубель, *ЖЭТФ* **105**, 405 (1994).
31. H. L. Zhao, B. Z. Spivak, M. P. Celfand, and S. Feng, *Phys. Rev. B* **44**, 10760 (1991).
32. А. Л. Хорошилов, А. В. Богач, С. В. Демишев, К. М. Красиков, С. Е. Половец, Н. Ю. Шидеялова, В. Б. Филипов, Н. Е. Случанко, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 150 (2022).
33. A. Glatz, I. S. Beloborodov, and V. M. Vinokur, *EPL* **82**, 47002 (2008).
34. A. A. Timopheev, S. M. Ryabchenko, V. M. Kalita, A. F. Lozenko, P. A. Trotsenko, V. A. Stephanovich, A. M. Grishin, and M. Munakata, *J. Appl. Phys.* **105**, 083905 (2009).
35. A. A. Timopheev, I. Bdikin, A. F. Lozenko, O. V. Stognei, A. V. Sitnikov, A. V. Los, and N. A. Sobolev, *J. Appl. Phys.* **111**, 123915 (2012).
36. M. I. Blinov, M. A. Shakhov, V. V. Rylkov, E. Lahderanta, V. N. Prudnikov, S. N. Nikolaev, A. V. Sitnikov, and A. B. Granovsky, *J. Magn. Magn. Mater.* **469**, 155 (2019).
37. Е. А. Фадеев, М. А. Шахов, Е. Лахдеранта, А. Н. Талденков, А. Л. Васильев, А. В. Ситников, В. В. Рыльков, А. Б. Грановский, *ЖЭТФ* **160**(6), 903 (2021).
38. A. P. Zhernov, *Low Temp. Phys.* **26**, 908 (2000).

Плазменные возбуждения в SiGe/Si квантовых ямах

А. Р. Хисамеева⁺¹⁾, А. В. Щепетильников^{+*}, Г. А. Николаев⁺, С. А. Лопатина^{*+}, Я. В. Федотова⁺,
И. В. Кукушкин⁺

⁺Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногловка, Россия

^{*}Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 апреля 2023 г.

После переработки 1 июня 2023 г.

Принята к публикации 1 июня 2023 г.

Было проведено подробное исследование плазменных и магнитоплазменных возбуждений в высококачественных нелегированных двумерных системах на основе SiGe/Si квантовых ям. Двумерная электронная система формировалась при приложении напряжения к верхнему затвору, частично прозрачно для субтерагерцового излучения в частотном диапазоне 20–160 ГГц. Для сравнения также приведены результаты для SiGe/Si квантовых ям с δ -слоем легирования Sb. Были непосредственно определены транспортные и квантовые времена рассеяния для обеих структур. Было установлено, что величина эффективной массы электронов практически не зависит от плотности двумерных электронов в широком диапазоне значений.

DOI: 10.31857/S1234567823130116, EDN: gcfgrp

Последовательное освоение диапазона частот электромагнитного излучения, лежащего в области от 0.1 до 1.0 ТГц, является ключевым направлением современной физики, техники и приборостроения. Например, в данном частотном диапазоне возможно создание систем радиовидения, которые способны решать целый спектр различных прикладных задач в области промышленного неразрушающего контроля качества [1–4], в сельском хозяйстве [5] и в сфере безопасности [6–11]. Более того, именно в субтерагерцовом частотном диапазоне предполагается построение телекоммуникационных сетей следующего поколения [12–14]. С другой стороны, развитие субтерагерцовых технологий позволит значительно продвинуться и в фундаментальной науке, особенно в физике конденсированного состояния [15–20], биомедицине [21–26] и астрофизике [27].

Для успешного развития и широкомасштабного применения субтерагерцовых технологий на практике необходимо создание дешевых и эффективных детекторов электромагнитного излучения, которые при этом характеризовались бы достаточно высоким быстродействием. Всем перечисленным требованиям удовлетворяют детекторы, работающие по принципу выпрямления переменного поля плазменных волн, возбуждаемых в двумерном канале падающей электромагнитной волной, на искусственном дефекте, сформированном в электронной систе-

ме [28–31]. Основные параметры детектора, такие как чувствительность и быстродействие, определяются свойствами спектра плазменных волн, а значит, изучение свойств таких коллективных колебаний зарядовой плотности является крайне важной научной задачей.

В рамках данной работы были подробно исследованы свойства плазменных возбуждений в высококачественных двумерных системах, формирующихся в SiGe/Si квантовых ямах. Такие полупроводниковые гетероструктуры имеют целый ряд уникальных характеристик, в том числе и с точки зрения использования их как основы для детекторов субтерагерцового излучения. В первую очередь, рассматриваемые структуры характеризуются высокой чистотой и качеством, так, низкотемпературная подвижность в них достигает значений 2×10^6 см²/Вс, а транспортные времена рассеяния сравнимы с временами рассеяния в GaAs гетероструктурах. С другой стороны, SiGe/Si структуры полностью совместимы со стандартными кремниевыми технологиями, что в перспективе обеспечит низкую себестоимость детекторов и возможность крупносерийного производства. Например, омические контакты можно изготавливать путем ионной имплантации с последующей активацией [32]. С фундаментальной точки зрения, в подобных гетероструктурах эффективная масса двумерных электронов достаточно велика, что обеспечивает доминирование характерной энергии электрон-электронного взаимодействия над ки-

¹⁾e-mail: akhismeeva@issp.ac.ru

нетической энергией. В таких условиях электрон-электронные корреляции существенно модифицируют основные свойства такой материальной системы [33]. Как следствие, изучение спектра плазменных колебаний в SiGe/Si полупроводниковых гетероструктурах представляет собой крайне важную задачу.

Свойства коллективных плазменных мод уже частично были исследованы в SiGe/Si квантовых ямах ранее в [34, 35]. В указанных работах эксперименты проводились на легированных ямах с характерными низкотемпературными подвижностями $\mu \sim 10^5 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Ключевым отличием наших исследований является тот факт, что плазменные возбуждения изучались в структуре, не имеющей слоя дополнительного легирования. При этом двумерная электронная система (ДЭС) в яме формировалась при приложении напряжения к верхнему затвору [36]. В таких системах подвижность электронов увеличивается более чем на порядок и достигает рекордных значений в $2 \times 10^6 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Отметим, что в подобных структурах спектр плазменных возбуждений изучался впервые. Во многом это связано с необходимостью нанесения на образец верхнего затвора, в качестве которого, как правило, используется достаточно толстый сплошной слой золота, полностью отражающего падающее излучение и, как следствие, плазменные возбуждения в рассматриваемых структурах крайне сложно возбудить. Мы же использовали специальные тонкие слои хрома, характерное сопротивление на квадрат которых превышало импеданс вакуума. Как следствие, существенная часть излучения проходила сквозь слой металлизации. Аналогичный подход, например, с успехом применялся при изучении электронного парамагнитного резонанса в GaN/AlGaIn гетеропереходах [37].

Исследования проводились на нелегированной высококачественной структуре SiGe/Si, выращенной методом сверхвысоковакуумного химического осаждения из газовой фазы (UHVCVD) [36]. Квантовая яма с шириной $w = 15 \text{ нм}$ была сформирована между барьерными слоями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0.14$). Образцы представляли собой стандартные холловские мостики шириной $W = 120 \text{ мкм}$ с омическими контактами, сформированными напылением AuSb с последующим термическим отжигом. На поверхность образца посредством напыления был сформирован слой диэлектрика SiO (200 нм). Для формирования двумерной электронной системы и последующих исследований при помощи микроволновой спектроскопии была отработана и применена методика нанесения частично прозрачного для сверхвы-

сокочастотного (СВЧ) излучения затвора в частотном диапазоне 20–160 ГГц путем термического напыления 7 нм пленки хрома на поверхность слоя диэлектрика. Характерное сопротивление при такой толщине затвора составляло 1 кОм, что превосходит импеданс свободного пространства 377 Ом. Вариация плотности двумерных электронов в широком диапазоне $n_s = 1.6\text{--}2.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ производилась посредством приложения напряжения на затвор V_g , типичные низкотемпературные подвижности μ были порядка $150\text{--}1000 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Схематичное изображение архитектуры образца показано на рис. 1d. Для сравнения были проведены аналогичные измерения на структурах SiGe/Si, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МВЕ) с δ -слоем легирования Sb и квантовой ямой с шириной $w = 15 \text{ нм}$ и барьерными слоями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с $x = 0.18$ (рис. 1e). Также методом стандартной фотолитографии на образце был сформирован холловский мостик шириной $W = 100 \text{ мкм}$, омический контакт создавался посредством термического напыления AuSb с последующим отжигом. Плотность двумерных электронов составляла $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ с соответствующей низкотемпературной подвижностью $\mu = 47 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Измерения проводились при температуре $T = 0.5\text{--}1.5 \text{ К}$, в магнитном поле до 10 Тл, ориентированном перпендикулярно плоскости двумерной электронной системы. Для обеих структур при росте квантовых ям Si в направлении [001] самыми низкими по энергии оказываются 2 долины, имеющие изотропную эффективную массу электронов $m = 0.2m_0$ в плоскости квантовой ямы.

Экспериментальная методика детектирования основывалась на чрезвычайной чувствительности продольного магнитосопротивления R_{xx} к разогреву ДЭС вследствие возбуждения плазменной волны в системе микроволновым излучением [38]. К исследуемому образцу микроволновое излучение подводилось по сверхразмерному волноводному с прямоугольным сечением $7.0 \times 3.5 \text{ мм}^2$ (WR 28) и частотой отсечки $f \approx 15 \text{ ГГц}$. Измерения проводились в диапазоне СВЧ-излучения $f = 20\text{--}160 \text{ ГГц}$, обеспечиваемом серией генераторов с сопряженными блоками умножения частоты. Более подробно об экспериментальной технике можно прочитать в наших предыдущих работах [39, 40]. На эксперименте с целью улучшения соотношения сигнал-шум использовалась схема двойного синхронного детектирования. По образцу пропускался переменный ток (с амплитудой $I = 0.1\text{--}1 \text{ мкА}$ с частотой $f = 2 \text{ кГц}$), напряжение V_{xx} снималось с двух потенциометрических контактов посредством первого синхронного детек-

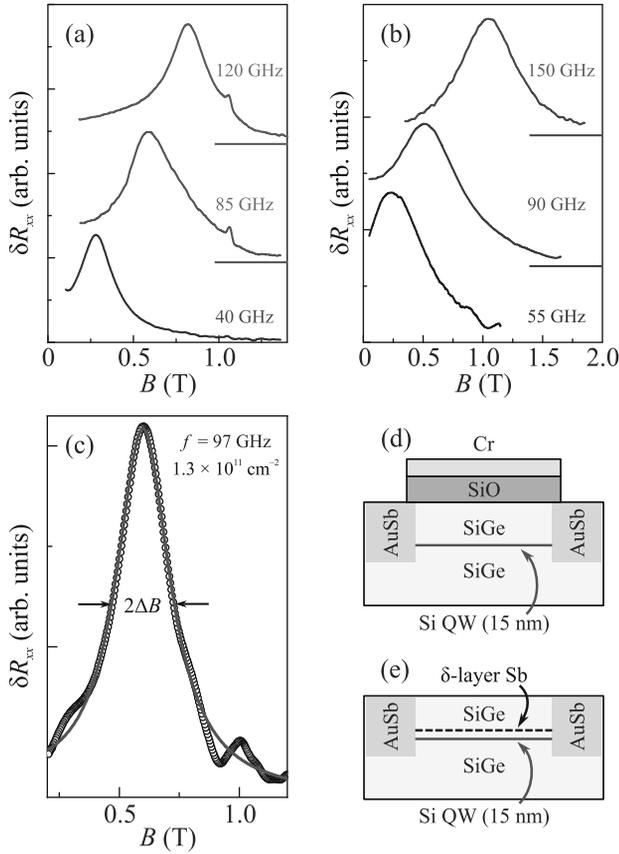


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость добавки к продольному сопротивлению ΔR_{xx} от магнитного поля B для серии микроволновых частот в случае (a) – нелегированной структуры SiGe/Si с затвором при $n_s = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 0.8 \text{ В}$) и (b) – легированной структуры SiGe/Si при $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Прямыми линиями отмечены уровни сигнала без микроволнового излучения; (c) – пример теоретической подгонки согласно формуле (1) для нелегированной структуры SiGe/Si с затвором $n_s = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 0.8 \text{ В}$) при частоте $f = 97 \text{ ГГц}$; схематическое изображение архитектуры образцов для (d) – нелегированной структуры SiGe/Si с затвором (e) легированной структуры SiGe/Si

тора. Сигнал с выхода первого синхронного детектора поступал на вход второго, настроенного на частоту амплитудной модуляции СВЧ-излучения f_{mod} , падающего на образец. Таким образом, на эксперименте измерялась добавка к продольному сопротивлению образца δR_{xx} . Так как механизмы рассеяния электронов сильно восприимчивы к температуре, это приводит к увеличению сопротивления образца R_{xx} , и на эксперименте магнитоплазменные возбуждения проявлялись как максимум при развертке магнитного поля B и фиксированной частоте (рис. 1a и b).

Типичная зависимость добавки к продольному сопротивлению ΔR_{xx} от магнитного поля B для серии микроволновых частот $f = 40, 85, 120 \text{ ГГц}$ для случая нелегированной структуры SiGe/Si с затвором с плотностью двумерных электронов $n = 1.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 0.8 \text{ В}$) показана на рис. 1a. Максимумы соответствуют возбуждению плазмона в системе, прямыми линиями отмечены уровни сигнала без микроволнового излучения. Каждая кривая демонстрирует выраженный резонанс, который с увеличением частоты СВЧ-излучения f сдвигается в сторону больших значений магнитного поля B , что соответствует возбуждению поперечной магнитоплазменной моды в системе. На рисунке 1b также приведены показательные зависимости для легированной структуры SiGe/Si без затвора ($n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$) для $f = 55, 90, 155 \text{ ГГц}$, которые тоже демонстрируют характерную для циклотронного магнитоплазменного возбуждения зависимость.

Для определения положения и ширины ΔB резонанса экспериментальные данные подгонялись теоретической зависимостью (рис. 1c). Форма резонанса связана с диссипативной частью продольной проводимости $\delta R_{xx} \propto \text{Re} \sigma_{xx}$, которая в свою очередь с хорошей точностью описывается лоренцевой зависимостью, предсказанной в рамках модели Друде:

$$\text{Re} \sigma_{xx}(\omega, B) = \frac{\sigma_0}{2\tau^2} \sum_{\pm} \frac{1}{(\omega \pm \omega_{\text{mp}}(B))^2 + 1/\tau^2}, \quad (1)$$

в которой σ_0 представляет собой друдевскую проводимость, τ – транспортное время рассеяния, а $\omega_{\text{mp}}(B)$ – дисперсия объемной магнитоплазменной моды в ДЭС, которая определяется следующим выражением [41]:

$$\omega_{\text{mp}}(B)^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2, \quad (2)$$

где ω_c – циклотронная частота, ω_p – плазменная частота в нулевом магнитном поле $B = 0 \text{ Тл}$, подчиняющаяся дисперсии двумерных плазмонов [42]:

$$\omega_p = 2\pi f_p = \sqrt{\frac{n_s e^2}{2m_p \epsilon_0 \epsilon^*}} q, \quad (3)$$

в которой $\epsilon^* = (\epsilon_{\text{Si}} + 1)/2$ – эффективная диэлектрическая проницаемость. Волновой вектор q для ДЭС в форме полоски с шириной W принимает значения $q = \pi N/W$ ($N = 1, 2, \dots$). Более точные вычисления для $N = 1$ дают $\omega_p = 0.85(2\pi f_p)$ [43].

По полученным экспериментальным данным в диапазоне частот $f = 20\text{--}160 \text{ ГГц}$ были построены зависимости положения магнитоплазменных резонансов по магнитному полю от частоты для нелегированной структуры SiGe/Si с затвором при $n_s =$

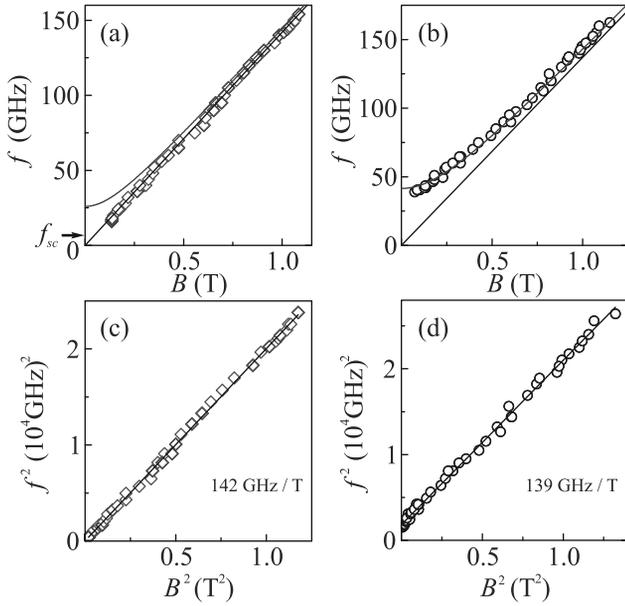


Рис. 2. (Цветной онлайн) Магнитодисперсия плазменных возбуждений для: (a) – нелегированной структуры SiGe/Si с затвором при $n_s = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 0.8 \text{ В}$) и (b) – легированной структуры SiGe/Si при $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Зелеными линиями показана теоретическая подгонка согласно формуле (2). Прямыми черными линиями отмечены положения циклотронного резонанса для массы $m = 0.2m_0$. Зависимость квадрата частоты магнитоплазменного возбуждения от квадрата величины магнитного поля для: (c) – нелегированной структуры SiGe/Si с затвором при $n_s = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 0.8 \text{ В}$) и (d) – легированной структуры SiGe/Si при $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

$1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $V_g = 0.8 \text{ В}$ (рис. 2a) и легированной структуры SiGe/Si при $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (рис. 2b). На графиках сплошной черной линией отмечены положения циклотронного резонанса $\omega_c = eB/m_c$ для массы $m = 0.2m_0$. На рисунках 2a и 2b зелеными сплошными линиями показаны теоретические подгонки согласно формуле (2). Для легированной структуры SiGe/Si без затвора (рис. 1b) положения резонансов по магнитному полю следуют линии циклотронного резонанса ω_c с отклонением в низкочастотной области из-за деполяризационного плазменного сдвига. Теоретическая подгонка, согласно формуле (2), позволила определить $f_p = \omega_p/2\pi = 41 \text{ ГГц}$ и соответствующее значение эффективной массы $m_p = (0.26 \pm 0.01)m_0$. Получившееся значение заметно отличается от величины циклотронной массы, при этом разница между ними превышает экспериментальную погрешность. По всей видимости, данное явление связано с наличием сильно электрон-электронного взаимодействия в системе.

Действительно, аналогичное различие наблюдалось, например, в узких AlAs квантовых ямах [39, 44], в которых большая величина эффективной массы обеспечивает доминирование характерной энергии электрон-электронного взаимодействия над кинетической энергией.

Однако для структуры с затвором (рис. 2a) магнитоплазменный резонанс строго следует линии циклотронного резонанса в исследуемом диапазоне частот. Для наглядности также была построена теоретическая магнитодисперсия согласно формуле (2) с $\omega_p = 27 \text{ ГГц}$, рассчитанной для соответствующих значений концентрации n_s и ширине W структуры. Из графика на рис. 2a видно, что экспериментальные данные не выходят на эту частоту, что однозначно указывает на то, что плазменные колебания возбуждаются в ДЭС, частично экранированной металлическим затвором.

В работе [45] для системы с металлическим затвором и бесконечно большой проводимостью, плазменная частота в пределе $qd \ll 1$ определяется следующим выражением:

$$\omega_{sc} = \sqrt{\frac{n_s e^2 d}{\epsilon_0 \epsilon^* m^*}} q. \quad (4)$$

В нашем случае, когда проводимость затвора имеет конечное значение, данная формула не вполне правомерна, но дает возможность провести качественную оценку величины частоты экранированного плазмона. При расстоянии от ДЭС до металлического затвора $d = 700 \text{ нм}$, $n_s = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, а волновой вектор q , в силу слабой пространственной неоднородности внешнего электромагнитного поля, связан с шириной полосы $W = 120 \text{ мкм}$ соотношением $q \approx \pi/W$, оценка плазменной частоты дает $f_{sc} = \omega_{sc}/2\pi = 5 \text{ ГГц}$ (положение отмечено на рис. 2a), что лежит вне исследуемого нами частотного диапазона, вследствие частоты отсечки волновода в 15 ГГц .

Также были определены значения эффективных циклотронных масс из наклона прямой зависимости квадрата резонансного магнитного поля от квадрата микроволнового излучения, как показано на рис. 2c и 2d. Значения для обеих структур совпадали с хорошей точностью и составляли $m_c = (0.20 \pm 0.01)m_0$.

Полная экспериментальная зависимость эффективной циклотронной массы m_c электронов от плотности двумерных электронов n_s показана на рис. 3. На графике собраны результаты для серии образцов: красные ромбы – для образца SiGe/Si с затвором при различных напряжениях на V_g и соответствующих n_s ; синий круг – для легированной структуры SiGe/Si; зеленый квадрат – результат, полу-

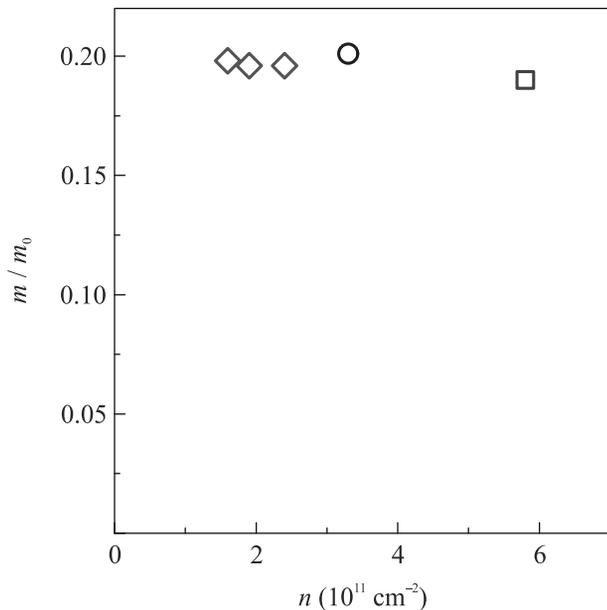


Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментальная зависимость эффективной циклотронной массы электронов от плотности двумерных электронов n_s . Красные ромбы соответствуют данным, полученным для образца SiGe/Si при различных напряжениях V_g на затворе, синий круг – результат для легированной структуры SiGe/Si. Зеленый квадрат демонстрирует результат, полученный в работе [35]

ченный для легированной структуры Si/SiGe в работе [35]. Согласно полученным результатам, циклотронная масса $m_c = (0.2 \pm 0.01)m_0$ практически не зависит от концентрации электронов n_s . Ранее в работах по исследованию магнитоплазменных резонансов в двумерных системах на основе гетеропереходов ZnO/MgZnO ($m = 0.33m_0$) [46] наблюдалось заметное возрастание эффективной массы с увеличением электронной плотности и связывалось это с непараболичностью зоны в условиях сильного кулоновского взаимодействия. Схожая картина наблюдалась в узких квантовых ямах AlAs ($m = 0.2m_0$) [39, 44]. Вследствие этого, тот факт, что циклотронная масса не зависит от концентрации двумерных электронов в SiGe/Si, где масса сравнима с величинами в гетеропереходах ZnO/MgZnO и узких квантовых ямах AlAs, является важным экспериментальным наблюдением.

Перейдем теперь к анализу ширины линии магнитоплазменного резонанса. Подчеркнем, что данная характеристика имеет исключительную важность с точки зрения использования SiGe/Si гетероструктур в качестве плазменных детекторов излучения субтерагерцового частотного диапазона. Малый латеральный размер мезы (около 100 микрон) в исследованных образцах в сравнении с длиной волны воз-

буждающего электромагнитного излучения обеспечивает пренебрежимо малый радиационный вклад в ширину линии [47, 48]. При этом ширина резонанса определяется исключительно квантовым временем рассеяния $\tau_q \sim \int W_{kk'} dk'$ (здесь $W_{kk'}$ – вероятность рассеяния электрона вблизи поверхности Ферми) и может существенно отличаться от транспортного времени рассеяния $\tau_{tr} \sim \int W_{kk'}(1 - \cos\theta) dk'$, θ – угол рассеяния, таким образом $\tau_q \approx \tau_{cr}$, где $\tau_{cr} = 1/2\pi\Delta f$. Как правило, квантовое время рассеяния не превышает транспортное, однако при определенных условиях (например, в условиях сильной локализации) τ_q становится больше τ_{tr} , как показано в работе [48]. Характерные значения транспортного времени рассеяния, вычисленного по значению продольного магнитосопротивления в нулевом магнитном поле, а также характерного времени τ_{cr} , определяемого по ширине линии резонанса, приведены в табл. 1. Несмотря на то, что τ_{tr} различаются в легированном образце и структуре с затвором на порядок, разница в ширине плазменных линий не настолько существенна, что отлично видно на рис. 4. Отметим также, что для структуры с затвором отношение τ_{tr}/τ_{cr} заметно больше 1, а для легированной структуры квантовое и транспортное времена одного порядка. Это может указывать на существенно большую неоднородность электронной системы в легированной SiGe/Si гетероструктуре.

Таблица 1. Времена релаксации в исследуемых структурах SiGe/Si

Структура	τ_{tr} (пс)	τ_{cr} (пс)
Gated SiGe/Si	50	9
Doped SiGe/Si	6	4

В заключение, впервые было проведено подробное исследование плазменных и магнитоплазменных возбуждений в высококачественных нелегированных двумерных системах на основе SiGe/Si квантовых ям. Двумерная электронная система формировалась при приложении напряжения к верхнему затвору, частично прозрачного для СВЧ излучения в частотном диапазоне 20–160 ГГц. Для сравнения также приведены результаты для SiGe/Si квантовых ям с δ -слоем легирования Sb. Были непосредственно опеределены времена транспортной и циклотронной релаксации для обеих структур. Было установлено, что величина эффективной массы электронов крайне слабо зависит от плотности двумерных электронов в широком диапазоне значений.

Работа была выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант # 22-72-00135).

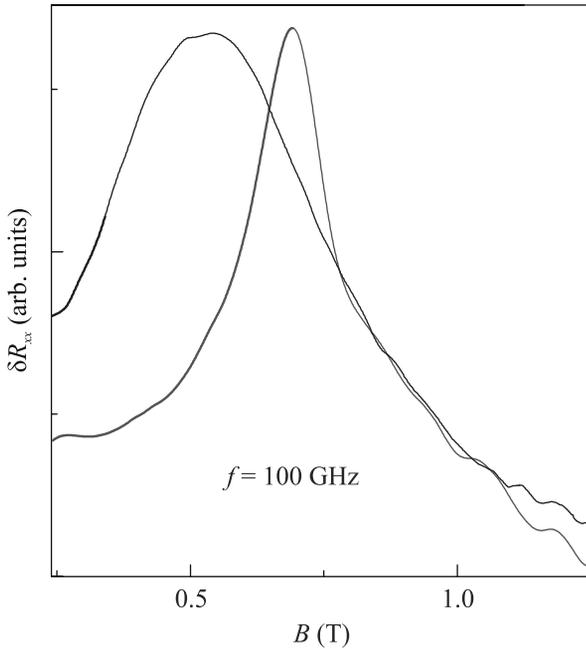


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сравнение зависимостей добавок к продольному сопротивлению ΔR_{xx} от магнитного поля B для нелегированной структуры SiGe/Si, с соответствующими $n_s = 2.4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($V_g = 1.3 \text{ В}$) и $\tau_t = 50 \text{ пс}$ (красная линия) и легированной структуры SiGe/Si (синяя линия) с $n_s = 3.3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $\tau_t = 6 \text{ пс}$ при частоте микроволнового излучения $f = 100 \text{ ГГц}$

Авторы благодарны Новикову Алексею Витальевичу и Институту физики микроструктур РАН за предоставленные для исследования легированные гетероструктуры SiGe/Si.

1. S. Wietzke, C. Jansen, C. Jördens, N. Krumbholz, N. Vieweg, M. Scheller, M. K. Shakfa, D. Romeike, T. Hochrein, M. Mikulics, and M. Koch, *Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering* **738506** (2009).
2. I. Amenabar, F. Lopez and A. Mendikute, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **34**(2), 152 (2013).
3. T. Pfeiffer, S. Weber, J. Klier, S. Bachtler, D. Molter, J. Jonuscheit, and G. Von Freymann, *Opt. Express* **26**, 12558 (2018).
4. A. V. Shchepetilnikov, P. A. Gusikhin, V. M. Muravev, B. D. Kaysin, G. E. Tsydynzhapov, A. A. Dremin, and I. V. Kukushkin, *Appl. Opt.* **60**(33), 10448 (2021).
5. A. V. Shchepetilnikov, A. M. Zarezin, V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, and I. V. Kukushkin, *Opt. Eng.* **59**(6), 061617 (2020).
6. D. M. Sheen, D. L. McMakin, and T. E. Hall, *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.* **49**(9), 1581 (2001).
7. Y. C. Shen, T. Lo, P. F. Taday, B. E. Cole, W. R. Tribe, and M. C. Kemp, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 241116 (2005).

8. D. Creeden, J. C. McCarthy, P. A. Ketteridge, P. G. Schunemann, T. Southward, J. J. Komiak, and E. P. Chicklis, *Opt. Express* **15**, 6478 (2007).
9. K. Murate, and K. Kawase, *J. Appl. Phys.* **124**, 160901 (2018).
10. G. Tsydynzhapov, P. Gusikhin, V. Muravev, A. Dremin, Yu. Nefyodov, and I. Kukushkin, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **41**, 632 (2020).
11. A. V. Shchepetilnikov, P. A. Gusikhin, V. M. Muravev, G. Tsydynzhapov, Yu. Nefyodov, A. Dremin, and I. Kukushkin, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **41**, 655 (2020).
12. J. Federici and L. Moeller, *J. Appl. Phys.* **107**, 111101 (2010).
13. H.-J. Song and T. Nagatsuma, *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* **1**, 256 (2011).
14. S. Koenig, D. Lopez-Diaz, J. Antes et al. (Collaboration), *Nat. Photonics* **7**, 977 (2013).
15. А. С. Казаков, А. В. Галева, А. В. Иконников, Д. Е. Долженко, Л. И. Рябова, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, М. И. Банников, С. Н. Данилов, Д. Р. Хохлов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 548 (2021).
16. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, А. М. Кадыков, М. А. Фадеев, Н. С. Куликов, В. В. Уточкин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, В. И. Гавриленко, Х.-В. Хюберс, Ф. Теппе, С. В. Морозов, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 679 (2019).
17. С. С. Криштопенко, С. Руффенах, Ф. Гонзалез-Посада, К. Консежо, В. Десра, Б. Жуо, В. Кнап, М. А. Фадеев, А. М. Кадыков, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, Г. Буасье, Э. Турнье, В. И. Гавриленко, Ф. Тепп, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 91 (2019).
18. М. Л. Савченко, З. Д. Квон, С. Кандуссио, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. Д. Ганичев, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 253 (2018).
19. З. Д. Квон, К.-М. Дантчер, М.-Т. Шерр, А. С. Ярошевич, Н. Н. Михайлов, *Письма в ЖЭТФ* **104**(10), 729 (2016).
20. В. В. Еналдиев, В. А. Волков, *Письма в ЖЭТФ* **104**(9), 646 (2016).
21. T. Loeffler, T. Bauer, K. Siebert, H. G. Roskos, A. Fitzgerald, and S. Czasch, *Opt. Express* **9**(12), 616 (2001).
22. P. Knobloch, C. Schildknecht, T. Kleine-Ostmann, M. Koch, S. Hoffmann, M. Hofmann, E. Rehberg, M. Sperling, K. Donhuijsen, G. Hein, and K. Pierz, *Phys. Med. Biol.* **47**(21), 3875 (2002).
23. W. Xu, L. Xie, Z. Ye, W. Gao, Ya. Yao, M. Chen, J. Qin, and Y. Ying, *Sci. Rep.* **5**, 11115 (2015).
24. B. B. Hu and M. C. Nuss, *Opt. Lett.* **20**(16), 1716 (1995).
25. O. A. Smolyanskaya, N. V. Chernomyrdin, A. A. Konovko et al. (Collaboration), *Progress in Quantum Electronics* **62**, 1 (2018).

26. K. I. Zaytsev, K. G. Kudrin, V. E. Karasik, I. V. Reshetov, and S. O. Yurchenko, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 053702 (2015).
27. P. H. Siegel, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **55**, 2957 (2007).
28. V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, A. M. Zarezin, I. V. Andreev, S. I. Gubarev, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **99**, 241406(R) (2019).
29. V. M. Muravev and I. V. Kukushkin, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 082102 (2012).
30. V. M. Muravev, V. V. Solov'ev, A. A. Fortunatov, G. E. Tsydynzhapov, and I. V. Kukushkin, *JETP Lett.* **103**(12), 792 (2012).
31. A. V. Shchepetilnikov, B. D. Kaysin, P. A. Gusikhin, V. M. Muravev, G. E. Tsydynzhapov, Yu. A. Nefyodov, A. A. Dremin, and I. V. Kukushkin, *Opt. Quantum Electron.* **51**, 376 (2019).
32. K.-Yu Chou, N.-W. Hsu, Y.-H. Su, Ch.-T. Chou, P.-Y. Chiu, Y. Chuang, and J.-Y. Li, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 083502 (2018).
33. M. Yu. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, Amy Y. X. Zhu, S. V. Kravchenko, S.-H. Huang, and C. W. Liu, *Phys. Rev. B* **99**, 081106(R) (2019).
34. R. Masutomi, K. Sasaki, I. Yasuda, A. Sekine, K. Sawano, Y. Shiraki, and T. Okamoto, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196404 (2011).
35. S. Sassine, Yu. Krupko, E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, J. C. Portal, J. M. Hartmann, and J. Zhang, *Solid State Commun.* **142**, 631 (2007).
36. T. M. Lu, D. C. Tsui, C.-H. Lee, and C. W. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 182102 (2009).
37. A. V. Shchepetilnikov, A. R. Khisameeva, V. V. Solovyev, A. Großer, T. Mikolajick, S. Schmult, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. Appl.* **18**, 024037 (2022).
38. E. Vasiliadou, G. Müller, D. Heitmann, D. Weiss, K. v. Klitzing, H. Nickel, W. Schlapp, and R. Lösch, *Phys. Rev. B* **48**, 17145 (1993).
39. A. R. Khisameeva, A. V. Shchepetilnikov, V. M. Muravev, S. I. Gubarev, D. D. Frolov, Yu. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, C. Reichl, L. Tiemann, W. Dietsche, and W. Wegscheider, *Phys. Rev. B* **97**, 115308 (2018).
40. A. V. Shchepetilnikov, D. D. Frolov, Y. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, L. Tiemann, C. Reichl, W. Dietsche, and W. Wegscheider, *JETP Lett.* **108**, 481 (2018).
41. A. V. Chaplik, *ZhETF* **62**, 746 (1972).
42. F. Stern, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
43. S. A. Mikhailov and N. A. Savostianova, *Phys. Rev. B* **71**, 035320 (2005).
44. A. R. Khisameeva, A. V. Shchepetilnikov, V. M. Muravev, S. I. Gubarev, D. D. Frolov, Yu. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, C. Reichl, W. Dietsche, and W. Wegscheider, *J. Appl. Phys.* **125**, 154501 (2019).
45. V. M. Muravev, C. Jiang, I. V. Kukushkin, J. H. Smet, V. Umansky, and K. von Klitzing, *Phys. Rev. B* **75**, 193307 (2007).
46. V. E. Kozlov, A. B. Van'kov, S. I. Gubarev, I. V. Kukushkin, V. V. Solovyev, J. Falson, D. Maryenko, Y. Kozuka, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, and J. H. Smet, *Phys. Rev. B* **91**, 085304 (2015).
47. S. A. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **54**, 10335 (1996).
48. I. V. Andreev, V. M. Muravev, V. N. Belyanin, and I. V. Kukushkin, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 202106 (2014).

MDI – Measurement Device Independent квантового распределения ключей

С. П. Кулик⁺, С. Н. Молотков^{*×1)}

⁺Центр квантовых технологий МГУ, *Академия криптографии Российской Федерации, 119331 Москва, Россия

[×]Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 2 июня 2023 г.

После переработки 2 июня 2023 г.

Принята к публикации 4 июня 2023 г.

Приведено прямое доказательство стойкости MDI протокола квантового распределения ключей через недоверенные узлы, которое базируется на фундаментальных энтропийных соотношениях неопределенностей. Проясняются причины удивительного совпадения выражений для длины секретного ключа для протокола BB84 и MDI протокола.

DOI: 10.31857/S1234567823130128, EDN: gdblmlf

1. Введение. Квантовая криптография решает центральную проблему симметричной криптографии – распределение общего секрета – криптографического ключа между пространственно удаленными пользователями через открытые квантовый и классический аутентичный каналы связи, которые доступны для прослушивания [1].

Базовой конфигурацией квантового распределения ключей (КРК) является конфигурация точка–точка, в которой ключ распределяется между двумя узлами. В существующих на сегодняшний день телекоммуникационных сетях требуется наличие общего ключа между любой парой узлов, которые не связаны непосредственно квантовым каналом связи. На сегодняшний день данная проблема решается посредством использования доверенных узлов, через которые происходит согласование ключей (см., например, [2–4]). Такое решение принято в китайской национальной сети [5] и российской университетской сети [6].

Доверенные узлы требуют полной криптографической защиты аппаратуры, поскольку на доверенном узле имеются квантовые ключи от соседних сегментов сети, соединенных с данным узлом. Иначе говоря, работа аппаратуры должна быть недоступна нарушителю. Требуется также обеспечить защиту от несанкционированной модификации работы аппаратуры.

В большинстве систем КРК ключ формируется в результате обработки фотоотчетов в паре однофотонных детекторов. Отсчет в одном детекторе озна-

чает бит 0 в ключе, отсчет во втором детекторе означает бит 1. По этой причине результаты работы детекторов не должны быть доступны нарушителю.

Имеются модификации КРК, которые позволяют сделать результаты работы детекторов доступными нарушителю – так называемое КРК с недоверенными детекторами [7]. Однако такая модификация не позволяет сделать недоверенным сам узел сети, а лишь решает задачу выноса детекторов в неконтролируемую зону.

В последнее десятилетие активно исследуются системы КРК с недоверенным промежуточным узлом. Такие системы КРК позволяют получить общий ключ между двумя узлами сети, которые соединены через промежуточный недоверенный узел, который не требует защиты аппаратуры на нем – нарушитель видит всю работу аппаратуры, включая результаты работы фотодетекторов. Данная идея была предложена в работе [8, 9], протокол КРК был назван MDI–Measurement Device Independent.

В работах [8, 9] были приведены лишь соображения, почему такая система КРК обеспечивает секретность распределяемых ключей, со ссылкой на то, что доказательство стойкости MDI протокола, которое не было приведено, аналогично доказательству секретности КРК для базового протокола BB84 [1].

Хотя протоколы совершенно разные, формула для длины секретного ключа для MDI протокола КРК совпадает со знаменитой формулой для протокола BB84, которая в асимптотическом пределе длинных последовательностей в прямом базисе + [11] (см. также ниже) имеет вид

$$\ell_+ \geq 1 - h(Q^x) - \text{leak}(Q^+), \quad (1)$$

¹⁾e-mail: sergei.molotkov@gmail.com

здесь $1 - h(Q^\times)$ – утечка информации к подслушивателю при атаках на квантовый канал связи в базисе \times , Q^\times – ошибка на приемной стороне Боба в этом базисе, $\text{leak}(Q^+)$ – утечка информации к подслушивателю при коррекции ошибок через классический канал связи в базисе $+$, Q^+ – ошибка в базисе $+$ (в шенноновском пределе $\text{leak}(Q^+) = h(Q^+)$), $h(x) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x)$ – бинарная энтропийная функция Шеннона, и формула (1) переходит в $\ell_+ \geq 1 - h(Q^\times) - h(Q^+)$.

Цель работы – прояснить причину столь удивительного совпадения выражений для длины секретного ключа для протокола BB84 и MDI протокола, а также привести явное доказательство стойкости MDI протокола КРК, основанное на фундаментальных энтропийных соотношениях неопределенностей [12, 13].

Различные подходы к доказательству стойкости протокола КРК BB84. Ниже при доказательстве стойкости MDI КРК и прояснении связи с базовым протоколом BB84 потребуются более подробные комментарии. Чтобы их сделать, необходимо напомнить различные подходы к доказательству секретности протокола BB84.

По-видимому, первое и достаточно сложное для понимания доказательство секретности протокола BB84 было дано в работе [14].

Далее в работе [15] доказательство стойкости BB84 было сведено к так называемой, ЭПР ((ЭПР от Эйнштейн–Подольский–Розен) версии протокола. Идея доказательства сводилась к тому, что Алиса и Боб используя “очистление” запутанности [16], получают некоторое количество чистых (идеальных) запутанных ЭПР пар, которые содержат идеальные корреляции состояний Алисы и Боба. Идеальные корреляции позволяют получить общий секретный ключ. Однако при очищении ЭПР пар требуется квантовая память. Второй момент – запутанность обладает свойством *моногамии* [17], т.е. если пара пользователей имеют распределенную идеальную ЭПР пару, то данное запутанное состояние не может быть коррелировано с другим квантовым состоянием нарушителя.

Следующий важный шаг был сделан в работе [10]. В данном доказательстве использовались квантовые коды коррекции ошибок. Было показано, что утечка информации к Еве в одном из базисов, связана с ошибкой в канале Алиса–Боб в сопряженном базисе. В этой работе была получена знаменитая формула (1) для длины ключа.

Важный шаг был сделан в работе [18], где доказательство секретности было дано в терминах бли-

зости в смысле следового расстояния между трехчастичными квантовыми состояниями Алиса–Боб–Ева, отвечающих реальной ситуации со вторжением Евы в квантовый канал связи и идеальным состоянием, когда состояние Евы не коррелировано с состоянием Алисы–Боба.

Существенное продвижение в понимании секретности протокола BB84 [19] было достигнуто с использованием фундаментальных энтропийных соотношений неопределенностей [12, 13] (см. также историю вопроса в [20], где имеется большое число ссылок и вариантов соотношений неопределенностей). Однако, энтропийные соотношения неопределенностей сами по себе не дают знание о явном виде квантовых состояний участников протокола.

В работе [21] была построена явная атака Евы на передаваемые состояния в протоколе BB84, которая достигает теоретического предела по критической ошибке $Q_c \approx 11\%$. Учет побочных каналов утечки информации требует знания явного вида квантовых состояний всех участников протокола. Явное построение квантовых состояний всех участников протокола позволило в дальнейшем позволило доказать секретность протокола не для идеальных ситуаций, а для реальных условий работы систем [22, 23]: в случае не строго однофотонных состояний, разных квантовых эффективностях детекторов, побочных каналов утечки информации к Еве, включая пассивное и активное зондирование элементов системы – фазовых модуляторов, модуляторов интенсивности, обратного переизлучения однофотонных детекторов (back flash), а также в случае конечных передаваемых последовательностей с учетом побочных каналов утечки информации.

2. MDI квантовое распределение ключей.

Прежде чем приступить к доказательству, для самодостаточности изложения приведем описание MDI протокола КРК с поляризационным кодированием в однофотонном случае [8].

Алиса и Боб случайно, равновероятно независимо друг от друга выбирают один из базисов $+$ – прямой или \times – диагональный, аналогично протоколу BB84 [1]. Внутри базиса Алиса и Боб равновероятно выбирают одно из ортогональных состояний, отвечающих 0 и 1,

$$\text{basis } + \begin{cases} 0 \rightarrow |0^+\rangle_{A',B'} \\ 1 \rightarrow |1^+\rangle_{A',B'} \end{cases}, \quad \text{basis } \times \begin{cases} 0 \rightarrow |0^\times\rangle_{A',B'} \\ 1 \rightarrow |1^\times\rangle_{A',B'} \end{cases}, \quad (2)$$

$$|0^\times\rangle_{A',B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^+\rangle_{A',B'} + |1^+\rangle_{A',B'}),$$

$$|1^\times\rangle_{A',B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^+\rangle_{A',B'} - |1^+\rangle_{A',B'}),$$

где состояния $|0^+\rangle_{A',B'}$, $|1^+\rangle_{A',B'}$ отвечают горизонтальной и вертикальной поляризациям в прямом базисе, соответственно, состояния $|0^\times\rangle_{A',B'}$, $|1^\times\rangle_{A',B'}$ отвечают ортогональным поляризациям в диагональном базисе, повернутом на $\pi/4$ относительно прямого базиса

Состояния (2) поступают на недоверенный узел, на котором происходят измерения – более формально, реализуются проекции состояний на запутанные состояния – измерения в неполном белловском базисе. В базисе $+$ запутанные состояния имеют вид: $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'} \pm |1^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'})$.

Измерения в неполном белловском базисе реализуются оптической схемой с линейными элементами [8, 24].

Измерения в полном белловском базисе $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'}$, $|\Phi^\pm\rangle_{A'B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'} \pm |1^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'})$ требуют нелинейных оптических элементов, поэтому гораздо более сложны в экспериментальной реализации.

Отметим, что впервые измерения в полном белловском базисе в экспериментах по телепортации были сделаны в работе [25].

Результаты измерений на недоверенном узле доступны всем, включая нарушителя. После серии измерений, посылки, в которых Алиса и Боб использовали разные базисы, отбрасываются.

В базисе $+$ после отсчета в каналах измерений $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'}$ Боб инвертирует бит, который он посылал. В этом случае привязка происходит к биту Алисы. Это связано со следующим. Если не было вторжений в квантовый канал связи, то отсчет в каналах измерений $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'}$ будет иметь место только в том случае, когда Алиса послала 0, а Боб послал 1 (и наоборот, Алиса послала 1, Боб 0). Для получения общего одинакового бита, Боб инвертирует свой посланный бит. Происходит синхронизация битов Алисы и Боба. Вторжение в квантовый канал связи будет приводить к ошибкам.

При посылке Алисой 0 и Бобом 0, без вторжения в квантовый канал связи, отсчета на недоверенном узле не будет. При вторжении в квантовый канал будут отсчеты, приводящие к ошибкам в битовой последовательности Боба.

Состояние $|\Psi^+\rangle_{A'B'}$ в базисе $+$, переходит в состояние $|\Phi^-\rangle_{A'B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^\times\rangle_{A'} \otimes |0^\times\rangle_{B'} - |1^\times\rangle_{A'} \otimes |1^\times\rangle_{B'})$ в базисе \times , которое содержит компоненты 00 и 11, что не требует инверсии бита Боба при отсчете в этом канале измерения. Состояние $|\Psi^-\rangle_{A'B'}$ инвариантно к смене базисов; оно переходит в состояние

$|\Psi^-\rangle_{A'B'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0^\times\rangle_{A'} \otimes |1^\times\rangle_{B'} - |1^\times\rangle_{A'} \otimes |0^\times\rangle_{B'})$. Поэтому при отсчете в канале $|\Psi^-\rangle_{A'B'}$ также как и в базисе $+$, Боб инвертирует свой бит. При отсчете в канале $|\Psi^+\rangle_{A'B'}$ в базисе \times Боб свой бит не инвертирует.

Далее часть посылок раскрывается для оценки вероятности ошибки. Оценка вероятности требуется для вычисления величины утечки информации к Еве, с учетом того, что ей известны отсчеты на недоверенном узле.

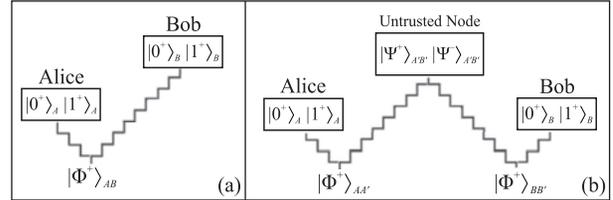


Рис. 1. (а) – Схематическое изображение запутанных состояний для ЭПР версии протокола BB84. (б) – Схематическое изображение запутанных состояний для ЭПР версии протокола MDI

3. Доказательство стойкости протокола, версия MDI протокола на запутанных состояниях. Алиса и Боб в каждой посылке посылают однофотонные состояния, отвечающие 0 или 1 в одном из базисов. Для использования энтропийных соотношений неопределенностей, а также прояснения связи с BB84 протоколом, удобно воспользоваться эквивалентной версией протокола на ЭПР состояниях.

ЭПР версия протокола BB84 сводится к следующему. Алиса готовит ЭПР пару (рис. 1а) $|\Phi^+\rangle_{AB}$. Подсистему A Алиса оставляет у себя как эталонную, подсистему B направляет к Бобу. Данная подсистема подвержена атакам Евы в квантовом канале. Затем Алиса производит измерение над своей подсистемой в одном из случайно выбранных базисов. В результате измерений подсистема A случайно и равновероятно оказывается в одном из состояний 0 или 1. Из-за идеальных корреляций в ЭПР состоянии, подсистема B оказывается в том же состоянии, что и подсистема Алисы. Такая процедура эквивалентна приготовлению равновероятно одного из состояний в базисе и посылке его в канал связи. ЭПР версия позволяет иметь общее прародительское состояние в любом базисе, и получить трехчастичную матрицу плотности Алиса-Боб-Ева, которая фигурирует в дальнейшем в энтропийных соотношениях неопределенностей.

В MDI протоколе кроме Алисы-Боба-Евы имеется еще одна подсистема – недоверенный узел, который является информационным бонусом для Евы.

ЭПР версия MDI протокола выглядит следующим образом. Алиса и Боб готовят свои ЭПР пары $|\Phi^+\rangle_{AA'}$ и $|\Phi^+\rangle_{BB'}$. Подсистемы A' и B' направляются на недоверенный узел, а подсистемы A и B остаются в распоряжении Алисы и Боба как эталонные. Подсистемы $A'B'$ подвержены атакам Евы в квантовом канале связи.

Далее Алиса и Боб производят измерения над своими эталонными подсистемами в одном из базисов. Если бы не было вторжений в квантовый канал связи, то имели бы место идеальные корреляции битов Алисы и Боба после измерений на недоверенном узле над подсистемой $A'B'$.

Рассмотрим теперь ситуацию более формально. ЭПР состояния Алисы и Боба имеют вид

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle_{AA'} \otimes |\Phi^+\rangle_{BB'} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_{A'} + |1^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_{A'}) \otimes \\ &\otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0^+\rangle_B \otimes |0^+\rangle_{B'} + |1^+\rangle_B \otimes |1^+\rangle_{B'}) = \\ &= \frac{1}{2} ((|0^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'}) + \\ &+ (|0^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}) + \\ &+ (|1^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'}) + \\ &+ (|1^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'})). \end{aligned} \quad (3)$$

Из (3) видно, что измерения на недоверенном узле над подсистемой $A'B'$ в базисе $|i^+\rangle_{A'} \otimes |j^+\rangle_{B'}$, ($i^+, j^+ = 0, 1$) приводят к корреляциям между подсистемами A и B . Например, пусть произошел отсчет в канале $|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}$, тогда в канале A и B возникнет отсчет в канале $|0^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B$.

Таким образом, Алиса и Боб, зная результат отсчета на недоверенном узле, могут знать какой бит получил партнер.

Если Ева вторгается в квантовый канал связи, то такие идеальные корреляции между битами Алисы и Боба будут нарушаться – возникнут ошибки в битовых последовательностях.

3.1. Атака нарушителя на состояния в квантовом канале связи. Действие Евы задается супероператором, любой супероператор (вполне положительное отображение – CPM – Completely Positive Map) унитарно представим [26, 27], т.е. может быть представлен как унитарное преобразование $U_{A'B'E} \otimes I_{AB}$ над исходным состоянием и вспомогательным состоянием $|E\rangle_E$ нарушителя.

Рассмотрим атаку Евы на состояния подсистемы $A'B'$. В базисе $+$ имеем (рассмотрение в базисе \times

аналогично, и сводится к замене индекса $+$ \rightarrow \times в формулах ниже)

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{ABA'B'E} &= (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) \times \\ &\times ((|\Phi^+\rangle_{AA'} \otimes |\Phi^+\rangle_{BB'}) \otimes |E\rangle_E) = \\ &= (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) \frac{1}{2} (((|0^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes \\ &\otimes |0^+\rangle_{B'}) + (|0^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}) + \\ &+ (|1^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'}) + \\ &+ (|1^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'})) \otimes |E\rangle_E). \end{aligned} \quad (4)$$

Получим действие унитарного преобразования подслушателя на отдельные компоненты состояния (4), которые потребуются для дальнейшей интерпретации исходов измерений,

$$\begin{aligned} (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) (((|0^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes \\ \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'})) \otimes |E\rangle_E) = \\ = (|0^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|\Phi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^+}^{0^+0^+}\rangle_E + \\ + |\Phi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^-}^{0^+0^+}\rangle_E + |\Psi^+\rangle_{A'B'} \otimes \\ \otimes |E_{\Psi^+}^{0^+0^+}\rangle_E + |\Psi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^-}^{0^+0^+}\rangle_E), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) (((|0^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|0^+\rangle_{A'} \otimes \\ \otimes |1^+\rangle_{B'})) \otimes |E\rangle_E) = \\ = (|0^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|\Phi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^+}^{0^+1^+}\rangle_E + \\ + |\Phi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^-}^{0^+1^+}\rangle_E + |\Psi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^+}^{0^+1^+}\rangle_E + \\ + |\Psi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^-}^{0^+1^+}\rangle_E), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) (((|1^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes \\ \otimes |0^+\rangle_{B'})) \otimes |E\rangle_E) = \\ = (|1^+\rangle_A \otimes |0^+\rangle_B) \otimes (|\Phi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^+}^{1^+0^+}\rangle_E + \\ + |\Phi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^-}^{1^+0^+}\rangle_E + \\ + |\Psi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^+}^{1^+0^+}\rangle_E + |\Psi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^-}^{1^+0^+}\rangle_E), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} (U_{A'B'E} \otimes I_{AB}) (((|1^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes \\ \otimes (|1^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'})) \otimes |E\rangle_E) = \\ = (|1^+\rangle_A \otimes |1^+\rangle_B) \otimes (|\Phi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^+}^{1^+1^+}\rangle_E + \\ + |\Phi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Phi^-}^{1^+1^+}\rangle_E + |\Psi^+\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^+}^{1^+1^+}\rangle_E + \\ + |\Psi^-\rangle_{A'B'} \otimes |E_{\Psi^-}^{1^+1^+}\rangle_E). \end{aligned} \quad (8)$$

Разложение состояния чистого состояния (4) в виде (5)–(8) представляет разложение состояния по базисным векторам состояний в пространстве $A'B'E$. В качестве базисных векторов в этом пространстве выбраны 4-е белловских состояния, и состояния Евы $|E_{\Psi^{\pm}}^{i+j^+}\rangle_E$, $|E_{\Phi^{\pm}}^{i+j^+}\rangle_E$ ($i, j = 0, 1$). Конкретный вид состояний Евы в данной работе не потребуется, однако может быть явно получен из условий унитарности $U_{A'B'E}$.

3.2. *Измерения на недоверенном узле и измерения Алисы и Боба.* Обсудим измерения над подсистемами A и B и измерения на недоверенном узле. Измерения Алисы и Боба в базисах $+$ и \times даются разложением единицы и независимы друг от друга. Для измерений Алисы имеем

$$\begin{aligned} I_A &= |0^+\rangle_{AA}\langle 0^+| + |1^+\rangle_{AA}\langle 1^+| = \\ &= |0^\times\rangle_{AA}\langle 0^\times| + |1^\times\rangle_{AA}\langle 1^\times|, \end{aligned} \quad (9)$$

аналогично для измерений Боба

$$\begin{aligned} I_B &= |0^+\rangle_{BB}\langle 0^+| + |1^+\rangle_{BB}\langle 1^+| = \\ &= |0^\times\rangle_{BB}\langle 0^\times| + |1^\times\rangle_{BB}\langle 1^\times|. \end{aligned} \quad (10)$$

Измерение на недоверенном узле дается частичным разложением единицы в подпространстве $(A'B')$, натянутом на векторы $|0\rangle_{A'} \otimes |1\rangle_{B'}$ и $|1\rangle_{A'} \otimes |0\rangle_{B'}$, находим

$$\bar{I}_{A'B'} = |\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^+| + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^-|. \quad (11)$$

Совместная трехчастичная матрица плотности всех участников, определяющая совместную вероятность исходов измерений на недоверенном узле в канале измерений $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^\pm|$ и в каналах измерений Алисы и Боба $|0^+\rangle_{AA}\langle 0^+|$, $|1^+\rangle_{AA}\langle 1^+|$, $|0^+\rangle_{BB}\langle 0^+|$, $|1^+\rangle_{BB}\langle 1^+|$, после измерений над общим квантовым состоянием (4) $\rho_{ABA'B'E} = |\Psi\rangle_{ABA'B'E}\langle \Psi|$, имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_{X+Y+\Psi+\Psi^-E+} &= \quad (12) \\ &= \sigma_B^X \left\{ \text{Tr}_{ABA'B'} \left\{ \left\{ \sum_{i,j=0,1} \sum_{m=+,-} (|i^+\rangle_{AA}\langle i^+| \otimes |j^+\rangle_{BB}\langle j^+|) \otimes (|\Psi^m\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^m|) \right\} \right\} \right. \\ &\quad \left. \rho_{ABA'B'E} \right\} \\ &= \left\{ \sum_{i,j=0,1} \sum_{m=+,-} (|i^+\rangle_{AA}\langle i^+| \otimes |j^+\rangle_{BB}\langle j^+|) \otimes (|\Psi^m\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^m|) \right\} \sigma_B^X. \end{aligned}$$

Поскольку после измерений Алиса и Боб получают битовые строки, и которые обычно обозначаются x, y , и которым сопоставлены ортогональные квантовые состояния, то в формуле (12) и ниже произведена замена индексов $A \rightarrow X$, $B \rightarrow Y$, $x \in \mathcal{X} = \{0, 1\}$, $y \in \mathcal{Y} = \{0, 1\}$.

После измерений в базисе $+$ Боб инвертирует свой бит, что задается действием оператора σ_B^X – оператор Паули. После измерений над $\rho_{ABA'B'E}$ и инвертированием своего бита Бобом, в базисе $+$ с учетом (5)–(8), получаем

$$\begin{aligned} \rho_{X+Y+\Psi+\Psi^-E} &= \rho_{X+Y+\pm E^+} = \rho_{X+Y+\bar{E}} = \quad (13) \\ &= |0^+1^+\rangle_{X+Y+X+Y+}\langle 0^+1^+| \otimes (|\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^+| \otimes \\ &\quad \otimes |E_{\Psi^+}^{0^+0^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^+}^{0^+0^+}| + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^-| \otimes \\ &\quad \otimes |E_{\Psi^-}^{0^+0^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^-}^{0^+0^+}|) + |0^+0^+\rangle_{X+Y+X+Y+}\langle 0^+0^+| \times \\ &\quad \times (|\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^+| \otimes |E_{\Psi^+}^{0^+1^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^+}^{0^+1^+}| + \\ &\quad + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^-| \otimes |E_{\Psi^-}^{0^+1^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^-}^{0^+1^+}|) + \\ &\quad + |1^+1^+\rangle_{X+Y+X+Y+}\langle 1^+1^+| \times (|\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^+| \otimes \\ &\quad \otimes |E_{\Psi^+}^{1^+0^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^+}^{1^+0^+}| + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^-| \otimes \\ &\quad \otimes |E_{\Psi^-}^{1^+0^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^-}^{1^+0^+}|) + |1^+0^+\rangle_{X+Y+X+Y+}\langle 1^+0^+| \times \\ &\quad \times (|\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^+| \otimes |E_{\Psi^+}^{1^+1^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^+}^{1^+1^+}| + \\ &\quad + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'}\langle \Psi^-| \otimes |E_{\Psi^-}^{1^+1^+}\rangle_{EE}\langle E_{\Psi^-}^{1^+1^+}|). \end{aligned}$$

В (13) введено обозначение $\Psi^+\Psi^-E = \bar{E}$, т.к. Еве доступен недоверенный узел, то состояние \bar{E} “полной” Евы включает в себя состояние Евы в квантовом канале и состояние на недоверенном узле.

Поскольку измерения (11) производятся в неполном белловском базисе, то требуется нормировка матрицы плотности (12), (13) на единицу, считаем, для экономии обозначений, что состояния Евы нормированы так (см. ниже), чтобы след матрицы плотности (13) был равен единице.

Для частичной матрицы плотности Алиса-Боб в базисе $+$ с учетом (13) находим

$$\begin{aligned} \rho_{X+Y+} &= \text{Tr}_{\bar{E}} \{ \rho_{X+Y+\bar{E}} \} = \quad (14) \\ &= |0^+\rangle_{X+X+}\langle 0^+| \otimes (p_{00}|0^+\rangle_{Y+Y+}\langle 0^+| + \\ &\quad + p_{01}|1^+\rangle_{Y+Y+}\langle 1^+|) + |1^+\rangle_{X+X+}\langle 1^+| \otimes \\ &\quad \otimes (p_{11}|1^+\rangle_{Y+Y+}\langle 1^+| + p_{10}|0^+\rangle_{Y+Y+}\langle 0^+|) = \\ &= \bar{p}_0^+|0^+\rangle_{X+X+}\langle 0^+| \otimes ((1 - Q_0^+)|0^+\rangle_{Y+Y+}\langle 0^+| + \end{aligned}$$

$$+ Q_0^+ |1^+\rangle_{Y+Y} \langle 1^+| + \bar{p}_1^+ |1^+\rangle_{X+X} \langle 1^+| \otimes \\ \otimes ((1 - Q_1^+) |1^+\rangle_{Y+Y} \langle 1^+| + Q_1^+ |0^+\rangle_{Y+Y} \langle 0^+|),$$

где нормировка состояний Евы

$$\bar{p}_0^+ = \frac{p_0}{p_0 + p_1}, \quad p_0 = p_{00} + p_{01}, \\ 1 - Q_0^+ = \frac{p_{00}}{p_0}, \quad Q_0^+ = \frac{p_{01}}{p_0}, \quad (15)$$

$$\bar{p}_1^+ = \frac{p_1}{p_0 + p_1}, \quad p_1 = p_{11} + p_{10}, \\ 1 - Q_1^+ = \frac{p_{11}}{p_1}, \quad Q_1^+ = \frac{p_{10}}{p_1}. \quad (16)$$

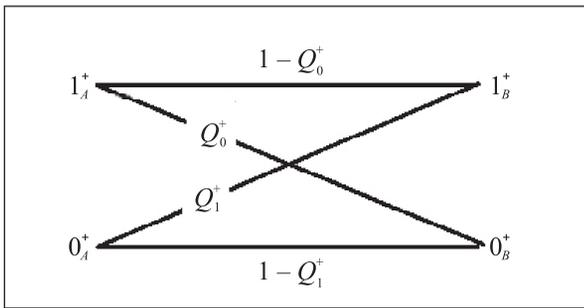


Рис. 2. Представление классического канала Алиса-Боб в базисе + вместе с обозначением переходных вероятностей

Вероятность ошибок в битах Боба относительно битов Алисы зависит от действий Евы в квантовом канале связи, далее, введены обозначения

$$p_{01} = {}_E \langle E_{\Psi^+}^{0^+0^+} | E_{\Psi^+}^{0^+0^+} \rangle_E + {}_E \langle E_{\Psi^-}^{0^+0^+} | E_{\Psi^-}^{0^+0^+} \rangle_E, \quad (17)$$

$$p_{10} = {}_E \langle E_{\Psi^+}^{1^+1^+} | E_{\Psi^+}^{1^+1^+} \rangle_E + {}_E \langle E_{\Psi^-}^{1^+1^+} | E_{\Psi^-}^{1^+1^+} \rangle_E, \quad (18)$$

$$p_{00} = {}_E \langle E_{\Psi^+}^{0^+1^+} | E_{\Psi^+}^{0^+1^+} \rangle_E + {}_E \langle E_{\Psi^-}^{0^+1^+} | E_{\Psi^-}^{0^+1^+} \rangle_E, \quad (19)$$

$$p_{11} = {}_E \langle E_{\Psi^+}^{1^+0^+} | E_{\Psi^+}^{1^+0^+} \rangle_E + {}_E \langle E_{\Psi^-}^{1^+0^+} | E_{\Psi^-}^{1^+0^+} \rangle_E. \quad (20)$$

Величины (15)–(20) имеют смысл условных (переходных) вероятностей для классического канала Алиса-Боб (рис. 2) и зависят от действий нарушителя. Матрица плотности Ева-недоверенный узел имеет вид

$$\rho_{\bar{E}} = \text{Tr}_{X+Y} \{ \rho_{X+Y+\bar{E}} \} = \quad (21) \\ = |\Psi^+\rangle_{A'B'A'B'} \langle \Psi^+| \otimes \left(|E_{\Psi^+}^{0^+0^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^+}^{0^+0^+}| + \right. \\ \left. + |E_{\Psi^+}^{0^+1^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^+}^{0^+1^+}| + |E_{\Psi^+}^{1^+0^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^+}^{1^+0^+}| + \right. \\ \left. + |E_{\Psi^+}^{1^+1^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^+}^{1^+1^+}| \right) + |\Psi^-\rangle_{A'B'A'B'} \langle \Psi^-| \otimes \\ \otimes \left(|E_{\Psi^-}^{0^+0^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^-}^{0^+0^+}| + |E_{\Psi^-}^{0^+1^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^-}^{0^+1^+}| + \right. \\ \left. + |E_{\Psi^-}^{1^+0^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^-}^{1^+0^+}| + |E_{\Psi^-}^{1^+1^+}\rangle_{EE} \langle E_{\Psi^-}^{1^+1^+}| \right).$$

3.3. Интерпретация исходов измерений, перенос корреляций между состояниями Алисы и Боба через недоверенный узел. Пусть Алиса послала состояние 0, а Боб 1 в базисе +. В этом случае, если произошел отсчет в канале \pm на недоверенном узле, то это означает, что имеют место корреляции – состояние $|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}$ с определенной вероятностью достигло недоверенного узла неискаженным – второе слагаемое в (13), что дало отсчет в каналах $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'A'B'}$, которые включают в себя такое состояние. Для согласования битов Алисы и Боба (привязка идет к биту Алисы), Боб инвертирует свой бит $1 \rightarrow 0$. В этом случае с вероятностью (15), (16) имеет место согласование битов Алисы и Боба.

Пусть теперь Алиса и Боб послали состояние $|0^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'}$. Если бы не было вторжений в квантовый канал связи нарушителем, то данные состояния не дали бы отсчет в каналах $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'A'B'}$ на недоверенном узле, поскольку $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'A'B'}$ не содержат таких состояний.

В случае вторжения в канал связи возникнет возмущение данных состояний – появятся компоненты $|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}$, которые дадут отсчет на недоверенном узле. После отсчета Боб инвертирует свой бит $0 \rightarrow 1$. В итоге биты Алиса (0) и Боба (1) будут рассогласованы – возникнет ошибка с вероятностью (15), (16).

Аналогично рассматриваются другие состояния.

Вероятность ошибок оценивается раскрытием Алисой и Бобом части последовательности, которая затем отбрасывается.

Здесь уместно напомнить ситуацию в протоколе BB84. В этом протоколе идеальные корреляции между состояниями Алисы и Боба исходно заложены в ЭПР пару Алисы $|\Phi^+\rangle_{AB}$ (рис. 1а)). Идеальные корреляции нарушаются – нарушается идеальная исходная “чистота” ЭПР пары после вторжений в канал нарушителя – после атак на подсистему B .

В MDI протоколе идеальные корреляции между состоянием Алисы и состоянием, посланным на недоверенный узел, заключены в ЭПР паре $|\Phi^+\rangle_{AA'}$. Аналогично для состояний Боба – корреляции исходно заложены в ЭПР паре $|\Phi^+\rangle_{BB'}$.

Без вторжения в квантовый канал нарушителя, измерения на недоверенном узле переносят идеальные корреляции внутри каждой ЭПР пары на идеальные корреляции между состояниями Алисы (подсистема A) и Боба (подсистема B). Иначе говоря, без вторжений в канал связи, чистота каждой ЭПР пары после измерений переносится на чистоту новой ЭПР пары Алисы и Боба.

Вторжение в канал связи нарушают идеальные корреляции новой ЭПР пары с некоторой вероятностью, неидеальность новой ЭПР пары приводит к рассогласованию битов Алисы и Боба – ошибкам битов Алисы и Боба.

Неформально говоря, чистоту (идеальность) новой ЭПР пары, которая имеет место с определенной вероятностью (см. (15), (16)), Алиса и Боб выясняют через результаты измерений на недоверенном узле и раскрытием части своих битовых последовательностей.

Напомним также, что инверсия бита Боба после факта измерений на недоверенном узле связана с тем, что измерения производятся в каналах $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'}$ – измерения реализуют проекцию на данные состояния, которые содержат состояния $|0^+\rangle_{A'} \otimes |1^+\rangle_{B'}$ и $|1^+\rangle_{A'} \otimes |0^+\rangle_{B'}$. Выбор измеряющих состояний $|\Psi^\pm\rangle_{A'B'}$ связан с простотой экспериментальной реализации таких измерений по схеме совпадений с помощью только линейных оптических элементов [8].

При посылке и измерении состояний в базисе \times инверсия бита Боба требуется только при отсчетах в канале измерений $|\Psi^-\rangle_{A'B'}$. При отсчетах в канале $|\Psi^+\rangle_{A'B'}$ инверсия бита Боба не требуется. Это связано с тем, что в базисе \times состояние $|\Psi^+\rangle_{A'B'}$ содержит компоненты состояний $|0^\times\rangle_{A'} \otimes |1^\times\rangle_{B'}$ и $|1^\times\rangle_{A'} \otimes |0^\times\rangle_{B'}$ (см. связь состояний в разных базисах (2)).

3.4. Вычисление условной энтропии Алиса-Боб. Таким образом, после измерений на недоверенном узле, Алиса и Боб оказываются в ситуации классического бинарного канала связи (необязательно симметричного, рис. 2). Данный канал описывается частичными матрицами плотности ρ_{X+Y+} и ρ_{Y+} , которые имеют диагональный вид. Для дальнейшего нам потребуются условные энтропии фон Неймана, с учетом (14) находим

$$H(\rho_{X+Y+}) = h(\bar{p}_0^+) + \bar{p}_0^+ h(Q_0^+) + (1 - \bar{p}_0^+) h(Q_1^+). \quad (22)$$

$$H(\rho_{Y+}) = h(\bar{p}^+), \quad \bar{p}^+ = \bar{p}_0^+(1 - Q_0^+) + (1 - \bar{p}_0^+) Q_1^+, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} H(\rho_{X+Y+} | \rho_{Y+}) &= \\ &= h(\bar{p}_0^+) - h(\bar{p}^+) + \bar{p}_0^+ h(Q_0^+) + (1 - \bar{p}_0^+) h(Q_1^+). \end{aligned} \quad (24)$$

В симметричном случае $Q_0^+ = Q_1^+ = Q$, $\bar{p}_0^+ = \frac{1}{2}$, получаем

$$H(\rho_{X+Y+} | \rho_{Y+}) = h(Q). \quad (25)$$

Неформальная интерпретация (25) сводится к тому, что $h(Q)$ – минимальное число бит в пересчете на посылку, которое требуется для исправления ошибок у

Боба в асимптотическом пределе длинных последовательностей – шенноновский предел.

4. Энтропийные соотношения неопределенностей, длина секретного ключа. Энтропийные соотношения неопределенностей являются теоретико-информационной переформулировкой соотношений неопределенностей для пары некоммутирующих наблюдаемых [28, 29] (см. также историю вопроса в обзоре [20]).

Пусть квантовое состояние, описывающее состояние трех участников протокола Алиса-Боб-Евандоверенный узел задается матрицей плотности в базисе $+$ $\rho_{X+Y+\bar{E}}$, соответственно в базисе \times $\rho_{X^\times Y^\times \bar{E}}$.

Энтропийные соотношения неопределенностей [20, 28, 29] для сглаженных энтропий \min и \max энтропий были доказаны в работе [12, 13]. Поскольку рассматриваем асимптотический предел длинных последовательностей, то сглаженные \min и \max энтропии переходят в энтропии фон Неймана, имеем

$$H(\rho_{X^\times \bar{E}} | \rho_{\bar{E}}) + H(\rho_{X+B} | \rho_B) \geq \log \left(\frac{1}{c} \right), \quad (26)$$

$$c = \max_{x^+, x^\times} \|\sqrt{\mathcal{M}_{x^+}} \sqrt{\mathcal{M}_{x^\times}}\|_\infty^2.$$

Пусть над матрицей плотности над подсистемой A проводится измерение, которое задается операторно-значными мерами $\{\mathcal{M}_{x^+}\}$ в базисе $+$, и $\{\mathcal{M}_{x^\times}\}$ в базисе \times . В нашем случае операторно-значные меры являются проекторами. Матрицы плотности после измерений над подсистемой A в базисе $+$ и базисе \times с учетом (14) имеют вид

$$\rho_{X^\times \bar{E}} = \sum_{x^\times} \sqrt{\mathcal{M}_{x^\times}} \rho_{A\bar{E}} \sqrt{\mathcal{M}_{x^\times}}, \quad \rho_{A\bar{E}} = \text{Tr}_{\bar{E}}\{\rho_{A\bar{E}\bar{E}}\}, \quad (27)$$

$$\rho_{X+B} = \sum_{x^+} \sqrt{\mathcal{M}_{x^+}} \rho_{AB} \sqrt{\mathcal{M}_{x^+}}, \quad \rho_{AB} = \text{Tr}_{\bar{E}}\{\rho_{A\bar{E}\bar{E}}\}. \quad (28)$$

Пусть над подсистемой B проводится измерение в базисах $+$ и \times , которое задается аналогичными операторно-значными мерами $\{\mathcal{M}_{y^+}\}$ в базисе $+$, и $\{\mathcal{M}_{y^\times}\}$ в базисе \times , что дает матрицы плотности

$$\rho_{X+Y+} = \sum_{y^+} \sqrt{\mathcal{M}_{y^+}} \rho_{X+B} \sqrt{\mathcal{M}_{y^+}}, \quad (29)$$

аналогично в базисе \times

$$\rho_{X^\times Y^\times} = \sum_{y^\times} \sqrt{\mathcal{M}_{y^\times}} \rho_{X+B} \sqrt{\mathcal{M}_{y^\times}}. \quad (30)$$

Учитывая, что $H(\rho_{X+Y+}|\rho_{Y+}) \geq H(\rho_{X+B}|\rho_B)$ (см., например, [18]), получаем

$$H(\rho_{X \times \bar{E}}|\rho_{\bar{E}}) + H(\rho_{X+Y+}|\rho_{Y+}) \geq \log\left(\frac{1}{c}\right), \quad (31)$$

$$c = |_{X+} \langle i^+ | j^\times \rangle_{X^\times}|^2 = \frac{1}{2}, \quad i^+, j^\times = 0, 1,$$

и аналогично в базисе \times . Для длины ключа в базисе \times находим

$$\begin{aligned} \ell_\times &\geq H(\rho_{X \times \bar{E}}|\rho_{\bar{E}}) - H(\rho_{X \times \bar{E}}|\rho_{\bar{E}}) \geq \quad (32) \\ &\geq 1 - H(\rho_{X+\bar{E}}|\rho_{\bar{E}}) - H(\rho_{X \times \bar{E}}|\rho_{\bar{E}}) \geq \\ &\geq \{1 - (h(\bar{p}_0^+) - h(\bar{p}^+) + \bar{p}_0^+ h(Q_0^+) + \\ &+ (1 - \bar{p}_0^+) h(Q_1^+))\} - \{h(\bar{p}_0^\times) - h(\bar{p}^\times) + \\ &+ \bar{p}_0^\times h(Q_0^\times) + (1 - \bar{p}_0^\times) h(Q_1^\times)\}. \end{aligned}$$

В формуле (32) величины $\bar{p}_0^\times, \bar{p}^\times, Q_{0,1}^\times$ имеют такой же смысл как и величины в (14)–(16), но при измерениях в базисе \times .

Энтропийные соотношения неопределенностей связывают нехватку информации $H(\rho_{X \times \bar{E}}|\rho_{\bar{E}})$ о битовой строке Алисы в базисе \times при условии, что нарушитель имеет в своем распоряжении квантовую систему (Ева-недоверенный узел) с нехваткой информации Боба $H(\rho_{X+Y+}|\rho_{Y+})$ о битовой строке Алисы в базисе $+$ при условии, что Боб имеет в своем распоряжении битовую строку Y^+ , коррелированную со строкой Алисы X^+ . Сумма двух дефицитов информации не может быть меньше одного бита. Неформально говоря, нехватка информации Боба представляет собой минимальное число бит, которые требуются Бобу для коррекции ошибок через классический аутентичный канал связи.

Энтропийные соотношения неопределенностей позволяют не перебирать всевозможные атаки Евы, но при этом позволяют получить утечку информации к Еве через наблюдаемые ошибки на приемной стороне – нехватку информации Боба. В симметричном случае находим

$$\ell_\times \geq 1 - 2h(Q), \quad (33)$$

что совпадает со знаменитой формулой для длины секретного ключа протокола BB84 [10].

5. Заключение. Обсудим неформальные причины секретности ключей в MDI протоколе. Алиса и Боб в каждой посылке посылают на недоверенный узел по одному биту информации. Измерения на недоверенном узле в базисе запутанных состояний раскрывают один бит – фактически бит четности Алисы и Боба. Остается один неизвестный бит.

При атаке на квантовый канал Ева производит ошибки между битами Алисы и Боба и получает дополнительную информацию, кроме бита четности.

При отсутствии ошибок между Алисой и Бобом, в отсутствии вторжения в квантовый канал Евой, имеют место идеальные корреляции между Алисой и Бобом в любом базисе. Данные корреляции между Алисой и Бобом переносятся через измерения на недоверенном узле. Идеальные корреляции в любом базисе означают идеальность ЭПР пары AB . При вторжении в квантовый канал связи идеальные корреляции между Алисой и Бобом нарушаются – идеальность ЭПР пары имеет место лишь с некоторой вероятностью, зависящей от вероятности ошибок.

После измерений на недоверенном узле в канале измерений, в котором не появляются ошибки у Боба, возникает неидеальная ЭПР пара между Алисой и Бобом, как это имеет место в протоколе BB84. Например, Алиса посылала 0, Боб посылал 1, и если с определенной вероятностью возник отсчет в канале измерений $|\Psi^+\rangle_{A'B'}$, то между Алисой и Бобом возникает идеальная ЭПР пара.

Энтропийные соотношения неопределенностей позволяют вычислить утечку информации к Еве через нехватку информации Боба по отношению к информации Алисы. Алиса и Боб связаны классическим бинарным каналом связи, аналогично тому, как это имеет место в протоколе BB84 (см., например, [30]). По этой причине утечка информации к Еве имеет такой же функциональный вид как в протоколе BB84.

Утечка информации к Еве при коррекции ошибок через классический канал определяется свойствами аналогичного классического канала между Алисой и Бобом, поэтому утечка имеет такой же вид, как в протоколе BB84.

Выражаем благодарность И. М. Арбекову, А. В. Уривскому за обсуждения и замечания, а также коллегам по Академии криптографии Российской Федерации.

С. П. Кулик благодарит ОАО РЖД за поддержку работы.

1. С. Н. Bennett and G. Brassard, *Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing*, In *Proc. IEEE Int. Conf. on Comp., Sys. and Signal Process.*, Bangalore, India (1984), p. 175.
2. Д. Д. Сукачев, *Успехи физических наук* **191**(10), 1077 (2021), раздел **6.2** “Доверенные узлы”.
3. И. М. Арбеков, С. Н. Молотков, *Математические вопросы криптографии* **14**(4) (2022), в печати.
4. С. Н. Молотков, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 470 (2023).

5. Q. Zhang, F. Xu, Y.-A. Chen, C.-Zh. Peng, and J. Pan, *Opt. Express* **26**, 24260 (2018).
6. <https://www.youtube.com/watch?v=0WAuDcYhKbo>.
7. К. А. Бальгин, С. П. Кулик, С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **116**, 128 (2022).
8. H.-K. Lo, M. Curty, and B. Qi, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 130503 (2012).
9. H.-K. Lo, M. Curty, and B. Qi, Supplemental Material at <http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevLett.108.130503>.
10. P. Shor and J. Preskill, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 441 (2000).
11. H.-K. Lo, X. Ma, and K. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 230504 (2005).
12. M. Tomamichel and R. Renner, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 110506 (2011).
13. M. Tomamichel, *A Framework for Non-Asymptotic Quantum Information Theory*, PhD thesis, ETH Zürich (2012); arXiv/quant-ph:1203.2142.
14. D. Mayers, *J. ACM*, **48**, 351 (2001).
15. H.-K. Lo and H. F. Chau, *Science* **283**, 2050 (1999).
16. C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, arxiv/quant-ph:9604024.
17. M. Koashi and A. Winter, *Phys. Rev. A* **69**, 022309 (2004).
18. R. Renner, *Security of Quantum Key Distribution*, PhD thesis, ETH Zürich (2005); arXiv/quant-ph:0512258.
19. M. Tomamichel, Ch. Ci Wen Lim, N. Gisin, and R. Renner, *Nat. Commun.* **3**, 1 (2012).
20. P. J. Coles, M. Berta, M. Tomamichel, and S. Wehner, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015002-1 (2017).
21. С. Н. Молотков, А. В. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ, **85**, 632 (2007).
22. S. N. Molotkov, *Laser Phys. Lett.* **18**, 045202 (2021).
23. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **160**, 327 (2021).
24. D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eible, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, *Nature (London)* **390**, 575 (1997).
25. Y.-H. Kim, S. P. Kulik, and Y. Shih, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1370 (2001).
26. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦНМО, М. (2010).
27. K. Kraus, *States, Effects and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory*, Springer, Berlin, Heidelberg (1983).
28. D. Deutsch, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 631 (1983).
29. H. Maassen and J. B. M. Uffink, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1103 (1988).
30. S. N. Molotkov, *Laser Phys. Lett.* **16**, 075203 (2019).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 118

Выпуск 2

25 июля 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора

Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2023

© Редакция журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2023

Влияние квантовой декогеренции на коллективные осцилляции нейтрино

А. А. Пуртова¹⁾, К. Л. Станкевич¹⁾, А. И. Студеникин¹⁾

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

Поступила в редакцию 31 мая 2023 г.

После переработки 9 июня 2023 г.

Принята к публикации 20 июня 2023 г.

Изучено влияние квантовой декогеренции массовых нейтринных состояний на коллективные осцилляции нейтрино для случая трех флейворов. При исследовании использовался метод, основанный на анализе уравнения Линдблада на устойчивость, при этом гамильтониан эволюции нейтрино включал в себя эффекты самодействия. Получены новые аналитические условия возникновения коллективных осцилляций нейтрино при взрыве сверхновой, которые учитывают эффект квантовой декогеренции нейтрино.

DOI: 10.31857/S123456782314001X, EDN: gxnxdj

Как известно, существует три флейвора нейтрино (электронное ν_e , мюонное ν_μ и тау-нейтрино ν_τ) и три массивных нейтрино (ν_1, ν_2, ν_3). Каждое флейворное нейтрино является суперпозицией массовых состояний нейтрино, и в результате при распространении возникают флейворные осцилляции нейтрино как в вакууме, так и в среде. Однако, за счет взаимодействия нейтрино со средой суперпозиция массовых нейтринных состояний может быть нарушена, что приводит к подавлению флейворных осцилляций нейтрино. Данное явление носит название квантовой декогеренции нейтрино.

Квантовая декогеренция нейтрино может возникнуть за счет взаимодействия с внешней средой как в рамках минимально расширенной Стандартной модели, так и за ее пределами. Ранее в литературе было показано, что источником квантовой декогеренции нейтрино может быть взаимодействие нейтрино с флуктуирующей внешней средой и флуктуирующим магнитным полем [1–3], а также взаимодействие с флуктуирующим гравитационным полем [4]. В работах [5–9] были параллельно разработаны два квантово-полевых подхода к описанию квантовой декогеренции нейтрино. Так, в [5–7] было показано, что квантовая декогеренция массовых состояний нейтрино может возникать за счет процессов распада нейтрино на более легкое нейтринное состояние и безмассовую частицу, а также за счет обратного процесса поглощения безмассовой частицы.

Во всех указанных статьях эволюция нейтрино описывается уравнением, которое по структуре является уравнением Линдблада [10, 11], вне зависимости от подхода описания и механизма возникновения квантовой декогеренции нейтрино. В данной работе мы исследуем влияние квантовой декогеренции массовых состояний нейтрино на коллективные осцилляции [12]. Рассматривая эволюцию нейтрино с помощью уравнения Линдблада, нами было показано, что квантовая декогеренция может выступать в качестве подавляющего фактора для коллективных осцилляций нейтрино. Ранее это было сделано нами для случая двух флейворов нейтрино в работе [13]. Здесь мы обобщаем результаты на случай нейтрино трех флейворов. Важность рассмотрения трех поколений нейтрино обусловлена тем, что коллективные осцилляции нейтрино возникают (и могут быть теоретически описаны) в случае как прямой, так и обратной иерархии масс нейтрино. В случае же двух поколений нейтрино коллективные осцилляции возникают только для обратной иерархии (см., например, [14]). Также в случае двух поколений нейтрино невозможно ввести дираковскую CP-нарушающую фазу [15].

Стоит отметить, что квантовая декогеренция нейтрино с использованием уравнения Линдблада активно исследуется в потоках нейтрино от земных источников [16–20] и от солнца [21].

Рассмотрим флейворные осцилляции нейтрино с учетом нейтрино-нейтринного взаимодействия и квантовой декогеренции массовых состояний нейтрино в случае трех флейворов. Исследование будет вестись с помощью метода анализа на устойчивость

¹⁾e-mail: finollari@gmail.com; kl.stankevich@physics.msu.ru; studenik@srd.sinp.msu.ru

уравнения эволюции [22–26], который позволяет получить численные оценки исследуемого эффекта в реальных астрофизических условиях.

Для описания эволюции нейтрино (антинейтрино) рассмотрим матрицу плотности $\rho(t)$ ($\bar{\rho}(t)$), которая подчиняется уравнению Линдблада:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[H, \rho(t)] + D[\rho(t)], \quad (1)$$

$$\frac{d\bar{\rho}(t)}{dt} = -i[\bar{H}, \bar{\rho}(t)] + D[\bar{\rho}(t)], \quad (2)$$

где $H = H_v + H_m + H_{\nu\nu}$ – полный гамильтониан нейтрино, который учитывает вакуумный вклад H_v , взаимодействие с внешней средой (электронами, нейтронами и протонами) H_m и нейтрино-нейтринное самодействие $H_{\nu\nu}$. Уравнения эволюции (1) и (2) записаны во флейворном базисе (второе уравнение описывает эволюцию антинейтрино). Отметим, что гамильтонианы нейтрино-нейтринного взаимодействия $H_{\nu\nu}$ и $\bar{H}_{\nu\nu}$ зависят от матриц плотности $\rho(t)$ и $\bar{\rho}(t)$ (см., например, обзор [12]).

Диссипатор $D[\rho]$ отвечает за эффекты квантовой декогеренции нейтринных состояний и определяется выражением следующего вида:

$$D[\rho] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} [V_k, \rho V_k^\dagger] + [V_k \rho, V_k^\dagger], \quad (3)$$

где V_k – диссипативные операторы, связанные со взаимодействием нейтрино как подсистемы и окружающей его среды, N – размерность пространства соответствующих матриц плотности, на которые действуют данные операторы (в двухфлейворном приближении $N = 2$, в трехфлейворном приближении $N = 3$).

Для наших целей удобно переписать уравнения (1) и (2), используя разложение операторов по базисным матрицам $SU(3)$. Каждый оператор можно записать с помощью разложения по матрицам Гелл-Манна (F^μ): $O = a_\mu F^\mu$. Тогда, с учетом разложения операторов, уравнения эволюции для нейтрино и антинейтрино представимы в виде:

$$\frac{\partial P_k(t)}{\partial t} F_k = 2\epsilon_{ijk} H_i P_j(t) F_k + D_{kl} P_l(t) F_k, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{P}_k(t)}{\partial t} F_k = 2\epsilon_{ijk} \bar{H}_i \bar{P}_j(t) F_k + D_{kl} \bar{P}_l(t) F_k, \quad (5)$$

где P_k (\bar{P}_k) и H_i (\bar{H}_i) – коэффициенты разложения матрицы плотности нейтрино (антинейтрино) и гамильтонианов по матрицам Гелл-Манна, ϵ_{ijk} –

структурные константы алгебры $su(3)$ (обобщенные символы Леви-Чивиты):

$$\epsilon_{123} = 1, \quad \epsilon_{458} = \epsilon_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad (6)$$

$$\epsilon_{147} = \epsilon_{165} = \epsilon_{246} = \epsilon_{257} = \epsilon_{345} = \epsilon_{376} = \frac{1}{2}.$$

Матрица D_{kl} в эффективном массовом базисе по построению должна быть симметричной и положительно определенной матрицей, так как $V_k = V_k^\dagger$ [16] (это условие обеспечивает неубывание энтропии фон Неймана открытой системы). Для сохранения полной вероятности недиагональные элементы необходимо занулить: $D_{\mu 0} = D_{0\nu} = 0$.

Коллективные осцилляции нейтрино возникают в сверхплотных астрофизических средах, в которых эффективный массовый базис практически совпадает с флейворным. В этом случае можно считать, что матрица D_{kl} в флейворном и эффективном массовом базисах совпадает. В результате матрица (D_{kl}) в общем виде представима следующим образом:

$$(D_{kl}) = -diag\{\Gamma_{21}, \Gamma_{21}, \Gamma_{11}, \Gamma_{31}, \Gamma_{31}, \Gamma_{32}, \Gamma_{32}, \Gamma_{22}\}. \quad (7)$$

Отметим, что если энергия нейтрино сохраняется при распространении нейтрино, т.е. $[V_k, H] = 0$, то заносятся параметры $\Gamma_{11} = \Gamma_{22} = 0$ [18].

Предположим, что в некоторый начальный момент времени система находилась в стационарном состоянии $\rho^0 = \rho(t = t_0)$ и тогда:

$$[H^0, \rho^0] = 0, \quad (8)$$

где $H^0 = H(\rho^0)$. В этом случае существует такой базис, в котором матрицы ρ^0 и H^0 диагональны:

$$H^0 = \begin{pmatrix} H_{11}^0 & 0 & 0 \\ 0 & H_{22}^0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{33}^0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\rho^0 = \begin{pmatrix} \rho_{11}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33}^0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Коэффициенты их разложения по матрицам Гелл-Манна имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} (H_k^0) &= (0, 0, H_3^0, 0, 0, 0, 0, H_8^0)^T, \\ (P_k^0) &= (0, 0, P_3^0, 0, 0, 0, 0, P_8^0)^T. \end{aligned} \quad (11)$$

Аналогичные формулы получаются и для случая антинейтрино.

Определив начальные условия, перейдем к анализу на устойчивость уравнений эволюции (4) и (5). Предполагаем малые зависящие от времени изменения амплитуд $\delta\rho$ и δH матрицы плотности и гамильтониана относительно их начальных значений ρ^0 и H^0 :

$$P_k = P_k^0 + \delta P_k, \text{ где } \delta P_k = P'_k e^{-i\omega t} + \text{э.с.}, \quad (12)$$

$$H_i = H_i^0 + \delta H_i, \text{ где } \delta H_i = H'_i e^{-i\omega t} + \text{э.с.}, \quad (13)$$

где P'_k и H'_i – вариационные амплитуды, а ω обозначает частоты возбужденных мод около начального положения. Элементы гамильтониана системы H_{ij} зависят от матриц плотности нейтрино ρ_{ij} и антинейтрино $\bar{\rho}_{ij}$, и тогда для H'_i можно записать:

$$H'_i = \frac{\partial H_i}{\partial P_i} P'_i + \frac{\partial H_i}{\partial \bar{P}_i} \bar{P}'_i. \quad (14)$$

Теперь подставим выражения (12)–(14) в уравнение эволюции (4) с учетом начальных условий (11) и свойств структурных констант ϵ_{ijk} . Пренебрегая членами второго порядка малости в коммутаторе $[\delta\rho, \delta H]$ и оставляя только недиагональные элементы матрицы плотности ($\rho'_{12} = P'_1 - iP'_2, \rho'_{13} = P'_4 - iP'_5, \rho'_{23} = P'_6 - iP'_7$), получим уравнение на собственные значения в матричной форме:

$$\left\{ i \begin{pmatrix} \Gamma & 0 \\ 0 & \Gamma \end{pmatrix} + \omega \right\} \begin{pmatrix} \rho' \\ \bar{\rho}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ \bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho' \\ \bar{\rho}' \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где столбец, состоящий из недиагональных элементов матрицы плотности, имеет вид

$$\begin{pmatrix} \rho' \\ \bar{\rho}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho'_{12} \\ \rho'_{13} \\ \rho'_{23} \\ \bar{\rho}'_{21} \\ \bar{\rho}'_{31} \\ \bar{\rho}'_{32} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Матрица декогеренции имеет вид:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_{21} & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{31} & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_{32} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

В правой части уравнения (15) введена матрица устойчивости, которую можно записать в блочной виде с помощью следующих матриц:

$$A = \begin{pmatrix} A_{12,12} & A_{12,13} & A_{12,23} \\ A_{13,12} & A_{13,13} & A_{13,23} \\ A_{23,12} & A_{23,13} & A_{23,23} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$B = \begin{pmatrix} B_{12,12} & B_{12,13} & B_{12,23} \\ B_{13,12} & B_{13,13} & B_{13,23} \\ B_{23,12} & B_{23,13} & B_{23,23} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Тогда выражения для элементов матрицы устойчивости можно представить в виде:

$$\begin{aligned} A_{ij,kl} &= (H_{kk}^0 - H_{ll}^0) \delta_{ik} \delta_{jl} + (\rho_{jj}^0 - \rho_{ii}^0) \frac{\partial H_{ij}}{\partial \rho_{kl}}, \\ B_{ij,kl} &= (\rho_{jj}^0 - \rho_{ii}^0) \frac{\partial H_{ij}}{\partial \rho_{lk}}, \\ \bar{A}_{ij,kl} &= (\bar{H}_{ll}^0 - \bar{H}_{kk}^0) \delta_{il} \delta_{jk} + (\bar{\rho}_{ii}^0 - \bar{\rho}_{jj}^0) \frac{\partial \bar{H}_{ij}}{\partial \bar{\rho}_{kl}}, \\ \bar{B}_{ij,kl} &= (\bar{\rho}_{ii}^0 - \bar{\rho}_{jj}^0) \frac{\partial \bar{H}_{ij}}{\partial \bar{\rho}_{lk}}, \end{aligned} \quad (20)$$

где индексы i, j, k и l пробегает значения от 1 до 3.

Дальнейший анализ системы на неустойчивость, наличие которой в нашем случае будет свидетельствовать о возможности коллективных осцилляций нейтрино, требует нахождения собственных значений матрицы стабильности, что для случая трех флейворов требует численных расчетов в силу большой размерности матрицы.

Из разложения (12) видно, что если частоты возбужденных мод ω принимают мнимые значения, то недиагональные элементы матрицы плотности демонстрируют экспоненциальный рост, что приводит к нестабильности системы. В результате возникают коллективные осцилляции.

Введем обозначение $\{\lambda_i\}$ для набора собственных значений матрицы стабильности (15), (18)–(19). Тогда условие возникновения коллективных осцилляций нейтрино между флейворными состояниями i и j можно записать в следующем виде:

$$\text{Im}[\lambda] \neq 0; \quad (21)$$

$$\text{Im}[\lambda] > \Gamma_{ij}. \quad (22)$$

Первое условие является общим условием возникновения коллективных осцилляций и было получено ранее в работах (см., например, [24]). Второе условие, полученное для случая трех флейворов, является новым и учитывает эффект квантовой декогеренции массовых состояний нейтрино.

Обратимся к численным оценкам влияния квантовой декогеренции нейтрино на коллективные осцилляции нейтрино. В работе [26] было показано, что мнимая часть собственных значений матрицы стабильности в реальных условиях взрыва сверхновой по порядку величины может равняться $\text{Im}[\lambda] \sim 10^{-17} : 10^{-18}$ ГэВ. Для оценки влияния квантовой

декогеренции нейтрино на коллективные осцилляции нейтрино можно использовать экспериментальные ограничения на значения параметров декогеренции. Так, для потоков нейтрино от земных источников параметр декогеренции ограничен по порядку $\Gamma < 10^{-24}$ ГэВ [16], для потоков солнечных нейтрино $\Gamma < 10^{-28}$ ГэВ [21].

Следует особо отметить, что указанные ограничения некорректно использовать в экстремальных условиях сверхновой, так как они были получены для значительно других внешних условий (для земной или солнечной материи). Так, например, в работе [6] было показано, что в условиях взрыва сверхновой параметр квантовой декогеренции за счет радиационного распада нейтрино может достигать значений $\Gamma \sim 10^{-21}$ ГэВ. Кроме того, квантовая декогеренция может также возникать за счет физики за пределами Стандартной модели [7, 27]. Из требования, что для возникновения коллективных осцилляций нейтрино необходимо, чтобы мнимая часть собственных значений матрицы стабильности была больше параметров декогеренции (см. уравнение (22)), мы предсказываем, что при регистрации потоков нейтрино от взрывов сверхновых будет возможно ограничить параметры декогеренции в экстремальных астрофизических условиях $\Gamma \sim 10^{-17} : 10^{-18}$ ГэВ.

Отметим важность получения ограничений на параметры квантовой декогеренции нейтрино из экспериментальных данных о потоках нейтрино от различных источников тем фактом, что это может позволить поставить ограничения на ширины различных нейтринных процессов (используя результаты работы [5–7]), а также на нестандартные взаимодействия нейтрино [8, 9].

Исследование выполнено в рамках гранта Российского научного фонда (проект # 22-22-00384).

А. А. Пуртова выражает благодарность за поддержку Национальному центру физики и математики (Россия, Саров).

1. F. N. Loreti and A. B. Balantekin, Phys. Rev. D **50**, 4762 (1994).
2. C. P. Burgess and D. Michaud, Ann. Phys. **256**, 1 (1997).
3. F. Benatti and R. Floreanini, Phys. Rev. D **71**, 013003 (2005).
4. M. Dvornikov, Phys. Rev. D **104**(4), 043018 (2021).
5. K. Stankevich and A. Studenikin, PoS, EPS-HEP2017, 645 (2018).
6. K. Stankevich and A. Studenikin, Phys. Rev. D **101**(5), 056004 (2020).
7. A. Lichkunov, K. Stankevich, A. Studenikin, and M. Vyalkov, PoS EPS-HEP2021, 202 (2022).
8. J. F. Nieves and S. Sahu, Phys. Rev. D **99**(9), 095013 (2019).
9. J. F. Nieves and S. Sahu, Phys. Rev. D **102**(5), 056007 (2020).
10. G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).
11. V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976).
12. H. Duan, G. M. Fuller, and Y.-Z. Qian, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **60**, 569 (2010).
13. K. Stankevich and A. Studenikin, PoS, ICHEP2020, 216 (2021).
14. A. Banerjee, A. Dighe, and G. Raffelt, Phys. Rev. D **84**, 053013 (2011).
15. C. Giunti, Phys. Lett. B **686**, 41 (2010).
16. G. Balieiro Gomes, M. M. Guzzo, P. C. de Holanda, and R. L. N. Oliveira, Phys. Rev. D **95**(11), 113005 (2017).
17. J. A. B. Coelho, W. A. Mann, and S. S. Bashar, Phys. Rev. Lett. **118**(22), 221801 (2017).
18. R. L. N. Oliveira, Eur. Phys. J. C **76**(7), 417 (2016).
19. G. B. Gomes, D. V. Forero, M. M. Guzzo, P. C. De Holanda, and R. L. N. Oliveira, Phys. Rev. D **100**(5), 055023 (2019).
20. A. de Gouvea, V. de Romeri, and C. A. Ternes, JHEP **08**, 018 (2020).
21. P. C. de Holanda, JCAP **03**, 012 (2020).
22. S. Sarikas, G. Raffelt, L. Hudepohl, and H.-Th. Janka, Phys. Rev. Lett. **108**, 061101 (2012).
23. N. Saviano, S. Chakraborty, T. Fischer, and A. Mirizzi, Phys. Rev. D **85**, 113002 (2012).
24. D. Vaananen and C. Volpe, Phys. Rev. D **88**, 065003 (2013).
25. D. Vaananen and G. C. McLaughlin, Phys. Rev. D **93**(10), 105044 (2016).
26. C. Döring, R. S. L. Hansen, and M. Lindner, JCAP **08**, 003 (2019).
27. J. F. Nieves and S. Sahu, Phys. Rev. D **100**(11), 115049 (2019).

Расчеты разности энергий связи многозарядных ионов Но и Ду

И. М. Савельев¹⁾, М. Ю. Кайгородов⁺, Ю. С. Кожедуб⁺, И. И. Тупицын⁺, В. М. Шабавев⁺*

⁺ Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

* Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, 188300 Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2023 г.

После переработки 21 июня 2023 г.

Принята к публикации 22 июня 2023 г.

В работе рассчитаны разности энергий связи ионов $^{163}\text{No}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ со степенями ионизации $q = 38, 39$ и 40 . Расчеты выполнены с использованием релятивистского метода конфигурационного взаимодействия и релятивистского метода связанных кластеров. Учтены вклады квантово-электродинамических эффектов, эффекта отдачи ядра и частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия. Погрешность полученных значений не превышает 1 эВ. Объединив настоящие результаты с разностью энергий связи соответствующих нейтральных атомов, рассчитанной в [I. M. Savelyev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, Phys. Rev. A **105**, 012806 (2022)], мы получили вторичные разности энергий связи между ионами и атомами. Эти значения могут быть использованы для определения количества энергии, выделяющейся в процессе электронного захвата в атоме ^{163}No (энергии бета-распада Q), при условии, что из эксперимента известна разница масс многозарядных ионов $^{163}\text{No}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$. Значение Q необходимо для экспериментов по установлению ограничения на абсолютную величину массы электронного нейтрино путем изучения процесса электронного захвата.

DOI: 10.31857/S1234567823140021, EDN: gybarh

Нейтрино – одна из самых интригующих тематик современной физики [1]. С одной стороны, в рамках Стандартной модели нейтрино является безмассовой частицей, с другой стороны, наблюдения нейтринных осцилляций установили, что нейтрино должно иметь ненулевую массу. Однако при этом, осцилляционные эксперименты чувствительны только к абсолютной разнице квадратов масс массовых состояний нейтрино и не позволяют определить абсолютную величину массы нейтрино. Ограничения на сумму масс нейтрино могут быть получены из анализа космологических данных [2, 3]. Согласно СРТ-инвариантности Стандартной модели, масса нейтрино должна быть в точности равна массе антинейтрино. Однако в настоящее время верхние пределы на массы электронных нейтрино и антинейтрино различаются на несколько порядков [4]. В этой связи несомненный интерес представляет прямое модельно-независимое экспериментальное определение массы нейтрино.

Наинизший прямой верхний предел на массу электронного антинейтрино получен коллаборацией KATRIN [5]. Это значение, равное 0.8 эВ, определено путем кинематического анализа β^- распада

в тритии. Наинизший лабораторный верхний предел на массу электронного нейтрино примерно на два порядка больше. Так, в [6] из анализа спектра рентгеновских лучей, испускаемых в процессе электронного захвата (ЕС) в изотопе ^{163}No , был установлен предел в 225 эВ. В эксперименте совершенно другого типа, основанном на изучении β^- распада голого ядра ^{163}Dy с образованием электрона в связанном состоянии, было получено ограничение в 410 эВ [7]. Несколько коллабораций [8–10] нацелены на то, чтобы улучшить текущий лабораторный предел на массу электронного нейтрино до нескольких эВ и сделать его сравнимым со значением предела для электронного антинейтрино. Эти эксперименты также основаны на изучении процесса ядерного электронного захвата в нейтральном атоме ^{163}No , но уже с использованием более точного калориметрического метода. Недавно, в рамках эксперимента ЕСНо [10], верхний предел на массу электронного нейтрино был понижен до значения порядка 150 эВ [11].

Для того чтобы извлечь из этих экспериментов ограничение на массу электронного нейтрино с точностью до 1 эВ, необходимо заранее знать разницу масс участвующих в распаде изотопов ^{163}No и ^{163}Dy , называемую также энергией бета-распада Q , по крайней мере, с такой же точностью. Измерение

¹⁾e-mail: savelevigorm@gmail.com

разности масс на требуемом уровне точности возможно выполнить для многозарядных ионов с помощью масс-спектрометров на базе ловушек Пеннинга [12, 13]. Так, совсем недавно была измерена разность масс ионов ^{163}Ho и ^{163}Dy со степенями ионизации 38, 39 и 40 [14].

Чтобы получить из разности масс многозарядных ионов ^{163}Ho и ^{163}Dy разность масс нейтральных атомов ^{163}Ho и ^{163}Dy , которая и есть искомая величина Q , нужно рассчитать разность энергий связи атомов и ионов с соответствующей точностью. В работе [15] были выполнены расчеты разности энергий связи для ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ со степенями ионизации $q = 30, 48$ и 56 . Цель настоящей статьи состоит в расширении результатов работы [15] расчетами для степеней ионизации, рассмотренных в эксперименте [14]. В работе используется атомная система единиц.

Мы рассматриваем разность масс Δm^q ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ с одинаковой кратностью ионизации q ,

$$\Delta m^q = \Delta m_n + m_e + \Delta E^q, \quad (1)$$

где Δm_n – разность масс ядер ^{163}Ho и ^{163}Dy , m_e – масса электрона, ΔE^q – разность полных энергий связи электронов в ионах. Разность масс нейтральных атомов ^{163}Ho и ^{163}Dy соответствует случаю $q = 0$:

$$\Delta m^0 = \Delta m_n + m_e + \Delta E^0. \quad (2)$$

Разность масс нейтральных атомов Δm^0 связана с разностью масс ионов Δm^q соотношением

$$\Delta m^0 = \Delta m^q + \Delta E^{0,q}, \quad (3)$$

где введена вторичная разность энергий связи

$$\Delta E^{0,q} = \Delta E^0 - \Delta E^q. \quad (4)$$

Настоящие расчеты основаны на использовании релятивистских гамильтонианов Дирака–Кулона (DC) и Дирака–Кулона–Брейта (DCB):

$$\hat{H}_{\text{DC}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}})\Lambda^+, \quad (5)$$

$$\hat{H}_{\text{DCB}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}} + \hat{H}_{\text{B}})\Lambda^+, \quad (6)$$

где \hat{H}_{D} – сумма одноэлектронных гамильтонианов Дирака:

$$\hat{H}_{\text{D}} = \sum_{i=1}^N [(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i)c + (\beta - 1)mc^2 + V(r_i)], \quad (7)$$

\hat{H}_{C} и \hat{H}_{B} – двухэлектронные операторы кулоновского и брейтовского взаимодействий соответственно:

$$\hat{H}_{\text{C}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (8)$$

$$\hat{H}_{\text{B}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{2r_{ij}} \left[\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (9)$$

Здесь $\boldsymbol{\alpha}$ – вектор, состоящий из матриц Дирака, \mathbf{p} – оператор импульса, \mathbf{r}_{ij} – положение i -го электрона относительно j -го, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$. Проектор Λ^+ гарантирует, что гамильтониан действует в пространстве состояний, соответствующих положительно-энергетическому спектру гамильтониана Дирака–Фока.

Основным методом, используемым для расчета ΔE^q , является релятивистский метод конфигурационного взаимодействия в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма (CI-DFS) [16–18]. Для учета квантово-электродинамических (КЭД) эффектов используется модельный КЭД оператор $\hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}}$ [19–21], позволяющий приближенно учитывать вклады вакуумной поляризации и собственной энергии в многоэлектронных системах. Оператор $\hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}}$ включается непосредственно в многоэлектронный гамильтониан DCB

$$\hat{H}_{\text{DCBQ}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}} + \hat{H}_{\text{B}} + \hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}})\Lambda^+. \quad (10)$$

Поправка на частотную зависимость брейтовского взаимодействия рассчитывается как среднее значение частотно-зависимой части оператора однофотонного обмена в кулоновской калибровке на многоэлектронной волновой функции, полученной методом CI-DFS. Вклад от эффекта отдачи ядра определяется усреднением релятивистского оператора отдачи ядра [22–25] на той же многоэлектронной волновой функции.

Чтобы проверить качество учета корреляционных эффектов методом CI-DFS при использовании гамильтониана DC, мы провели расчеты с использованием другого метода, а именно односсылочного релятивистского метода связанных кластеров, включающего полностью итеративные однократные, двукратные и пертурбативные трехкратные кластерные амплитуды (CCSD(T)). Для этой цели использовался пакет программ DIRAC23 [26, 27].

В качестве модели распределения заряда по ядру в расчетах методом CI-DFS используется модель Ферми, в то время как в расчетах методом CCSD(T) используется модель Гаусса, однако для рассматриваемых в работе свойств эта разница пренебрежимо мала. Значения среднеквадратичных радиусов (RMS) ядер взяты из работы [28].

Задача по расчету ΔE^q решается в несколько этапов. Сначала мы рассчитываем разность полных энергий связи ионов Ho и Dy методом CI-DFS с использованием гамильтониана DC. Конфигурации ос-

новых состояний рассматриваемых ионов Ho и Dy с $q = 38, 39$ и 40 приведены в табл. 1. В расчетах методом CI-DFS все занятые орбитали разделяются на остовные и валентные. Орбитали $1s2s2p$ относятся к замороженному остову, остальные занятые орбитали являются активными. Рассматриваются однократные и двукратные возбуждения из активных орбиталей в виртуальные. При этом анализируется сходимость ΔE^q в зависимости от числа виртуальных орбиталей. Мы начинаем расчеты с одной виртуальной s орбитали и постепенно расширяем базис виртуальных орбиталей в двух направлениях: путем последовательного добавления новых виртуальных орбиталей с бóльшим главным квантовым числом n и с бóльшим орбитальным квантовым числом l . Наши расчеты включают до пяти виртуальных орбиталей для каждого значения орбитального квантового числа l вплоть до i . Окончательные результаты получаются путем экстраполяции значений к пределу бесконечного базисного набора.

Таблица 1. Конфигурации основных состояний ионов Ho^{q+} и Dy^{q+}

q	Ho^{q+}		Dy^{q+}	
	Конфигурация	J	Конфигурация	J
38	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$	1/2	$[\text{Ar}]3d^{10}$	0
39	$[\text{Ar}]3d^{10}$	0	$[\text{Ar}]3d^9$	5/2
40	$[\text{Ar}]3d^9$	5/2	$[\text{Ar}]3d^8$	4

На следующем этапе мы оцениваем вклад от замороженного остова. Для этого мы проводим расчеты методом CI-DFS с использованием меньшего числа виртуальных орбиталей, которые адаптированы для корреляции сильно связанных остовных $1s2s2p$ электронов.

Далее, мы проверяем корректность наших результатов, полученных методом CI-DFS, проводя расчеты методом CCSD(T). В рамках подхода CCSD(T) все электроны являются активными, и для решения соответствующих уравнений используются стандартные базисные наборы `dyall.ae3z` и `dyall.ae4z`. Сходимость результатов CCSD(T) изучается аналогично тому, как это делалось для CI-DFS. Затем используется экстраполяция полученных данных к пределу бесконечного базисного набора. Следует отметить, что вклад от учета пертурбативных трехкратных кластерных амплитуд пренебрежимо мал для рассматриваемых систем.

Разности энергий связи для основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ с $q = 38, 39$ и 40 , рассчитанные методами CI-DFS и CCSD(T) с использованием гамильтониана DC, представлены в табл. 2. Результа-

ты, полученные с помощью двух концептуально разных методов, согласуются в пределах оцененных погрешностей.

Таблица 2. Разности энергий связи основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$, рассчитанные методами CI-DFS и CCSD(T) с использованием гамильтониана DC (а.е.)

q	CI-DFS	CCSD(T)
38	-461.298(7)	-461.305(11)
39	-502.088(16)	-502.089(16)
40	-500.931(17)	-500.934(17)

Для оценки вкладов от брейтовского взаимодействия, частотно-зависимого брейтовского взаимодействия, КЭД и эффекта ядерной отдачи была проведена серия расчетов методом CI-DFS с активными $3s3p3d$ (и $4s$ для Ho^{38+}) орбиталями. Оказалось, что необходимая точность вычисления этих поправок может быть достигнута при использовании меньшего базисного набора, чем при расчете энергий с использованием гамильтониана DC. Вклады от брейтовского взаимодействия и КЭД получены с использованием гамильтонианов \hat{H}_{DCB} и \hat{H}_{DCBQ} , соответственно, тогда как поправки на частотную зависимость брейтовского взаимодействия и на ядерную отдачу рассчитываются как средние значения соответствующих операторов. Погрешности, связанные с выбором моделей и среднеквадратичных радиусов ядер, оцениваются путем расчетов с различными моделями распределения заряда и варьирования среднеквадратичных радиусов ядер в пределах их экспериментальных погрешностей.

Окончательные результаты для полной разности энергий связи ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ для различных степеней ионизации $q = 38, 39$ и 40 , ΔE^q , а также отдельные вклады в эти разности от электронных корреляций, рассчитанных с использованием гамильтониана DCB, ΔE_{DCB}^q , от КЭД поправок, ΔE_{QED}^q , и поправок на частотно-зависимую часть брейтовского взаимодействия, ΔE_{BRFD}^q , представлены в табл. 3. Поправка от учета эффекта отдачи ядра составляет около 0.001 а.е. для всех рассмотренных q . Эта поправка включена в ΔE_{DCB}^q . Значения ΔE^q имеют два источника погрешности: в первых скобках указана погрешность, связанная с точностью учета электронных корреляций методом CI-DFS, а во вторых скобках представлена погрешность, связанная с выбором ядерных параметров. Разности энергий для ионов, ΔE^q , имеют меньшую погрешность, обусловленную электронными корреляциями, чем разность энергий нейтральных атомов из статьи [15], в силу более простой структуры электронных оболочек ионов. Отметим, что наши результаты, полу-

ченные методом Дирака–Фока без учета корреляционных эффектов, согласуются с результатами работы [29].

Таблица 3. Вклады в разности энергий основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$, ΔE^q , в рамках брейтовского приближения, ΔE_{DCB}^q , от частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{BRFD}^q , и от КЭД эффектов, ΔE_{QED}^q (а.е.). В последнем столбце представлены окончательные значения разностей энергий основных состояний. Числа в первых скобках показывают погрешность, связанную с точностью учета электронных корреляций, тогда как числа во вторых скобках представляют погрешность, связанную с конечными размерами ядер

q	ΔE_{DCB}^q	ΔE_{BRFD}^q	ΔE_{QED}^q	ΔE^q
38	-460.678	-0.0140	0.439	-460.253(9)(13)
39	-501.446	-0.0146	0.405	-501.056(16)(13)
40	-500.291	-0.0146	0.405	-499.901(17)(13)

Объединив вычисленные разности энергий ионов, ΔE^q , с разностью энергий нейтральных атомов, ΔE^0 , рассчитанной в работе [15], мы получаем вторичные разности энергий связи между ионами и атомами $\Delta E^{0,q}$, которые (в эВ) представлены в табл. 4. Погрешности, связанные с конечными размерами ядер, сокращаются во вторичных разностях $\Delta E^{0,q}$, и погрешности окончательных результатов в основном определяются разностью энергий связи нейтральных атомов.

Таблица 4. Вклады во вторичные разности энергий связи для атомов и ионов изотопов ^{163}Ho и ^{163}Dy , $\Delta E^{0,q}$, в рамках приближения Брейта, $\Delta E_{\text{DCB}}^{0,q}$, от частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия, $\Delta E_{\text{BRFD}}^{0,q}$, и от КЭД эффектов, $\Delta E_{\text{QED}}^{0,q}$ (эВ). Итоговые вторичные разности, $\Delta E^{0,q}$, приведены в последнем столбце

q	$\Delta E_{\text{DCB}}^{0,q}$	$\Delta E_{\text{BRFD}}^{0,q}$	$\Delta E_{\text{QED}}^{0,q}$	$\Delta E^{0,q}$
38	37.7	-0.03	-0.77	36.9(7)
39	1147.0	-0.01	0.17	1147.2(8)
40	1115.6	-0.01	0.18	1115.8(8)

Итак, в данной работе с помощью метода CI-DFS были рассчитаны разности полных энергий связи ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ для степеней ионизации $q = 38, 39$ и 40 . Погрешность полученных значений находится в пределах 1 эВ. Электронные корреляции учитываются в рамках гамильтониана DCB. В работе также учтены поправки от КЭД эффектов, частотной зависимости брейтовского взаимодействия и эффекта отдачи ядра. Объединив полученные разности энергий ионов с разностью энергий нейтральных атомов, вычисленной в работе [15], мы получили вторичные разности энергий связи между ионами и атомами. Настоящие результаты могут быть использованы для пересчета разности масс ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и

$^{163}\text{Dy}^{q+}$ в энергию электронного захвата Q в атоме ^{163}Ho , что необходимо для предстоящих экспериментов по понижению верхнего лабораторного предела на массу электронного нейтрино.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 22-62-00004.

1. K. Zuber, *Neutrino Physics*, Series in High Energy Physics, Cosmology, and Gravitation, 3rd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, USA and Abingdon, UK (2020).
2. S. Vagnozzi, E. Giusarma, O. Mena, K. Freese, M. Gerbino, S. Ho, and M. Lattanzi, *Phys. Rev. D* **96**, 123503 (2017).
3. M. M. Ivanov, M. Simonović, and M. Zaldarriaga, *Phys. Rev. D* **101**, 083504 (2020).
4. R. L. Workman, V. D. Burkert, V. Crede et al. (Particle Data Group), *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2022**, 083C01 (2022).
5. M. Aker, A. Beglarian, J. Behrens et al. (KATRIN Collaboration), *Nature Phys.* **18**, 160 (2022).
6. P. T. Springer, C. L. Bennett, and P. A. Baisden, *Phys. Rev. A* **35**, 679 (1987).
7. M. Jung, F. Bosch, K. Beckert et al., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2164 (1992).
8. B. Alpert, M. Balata, D. Bennett et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **75**, 112 (2015).
9. M. P. Croce, M. W. Rabin, V. Mocko et al. (Collaboration), *J. Low Temp. Phys.* **184**, 958 (2016).
10. L. Gastaldo, K. Blaum, K. Chrysalidis et al. (Collaboration), *The European Physical Journal Special Topics* **226**, 1623 (2017).
11. C. Velte, F. Ahrens, A. Barth et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **79**, 1026 (2019).
12. A. Rischka, H. Cakir, M. Door et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **124**, 113001 (2020).
13. P. Filianin, C. Lyu, M. Door et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **127**, 072502 (2021).
14. S. Eliseev and Y. Novikov, *Eur. Phys. J. A* **59**, 34 (2023).
15. I. M. Savelyev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **105**, 012806 (2022).
16. I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, J. R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, and J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **68**, 022511 (2003).
17. I. I. Tupitsyn, A. V. Volotka, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, G. Plumien, J. R. Crespo López-Urrutia, A. Lapierre, and J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **72**, 062503 (2005).
18. I. I. Tupitsyn, N. A. Zubova, V. M. Shabaev, G. Plumien, and T. Stöhlker, *Phys. Rev. A* **98**, 022517 (2018).
19. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Phys. Rev. A* **88**, 012513 (2013).

20. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Comput. Phys. Commun.* **189**, 175 (2015).
21. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Comput. Phys. Commun.* **223**, 69 (2018).
22. V. M. Shabaev, *Teor. Mat. Fiz.* **63**, 394 (1985) [*Theor. Math. Phys.* **63**, 588 (1985)].
23. V. M. Shabaev, *Yad. Fiz.* **47**, 107 (1988) [*Sov. J. Nucl. Phys.* **47**, 69 (1988)].
24. C. W. P. Palmer, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 5987 (1987).
25. V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **57**, 59 (1998).
26. T. Saue, R. Bast, A. S. P. Gomes et al. (Collaboration), *J. Chem. Phys.* **152**, 204104 (2020).
27. R. Bast, A. S. P. Gomes, T. Saue et al. (Collaboration), *Dirac23* (2023),
URL <https://doi.org/10.5281/zenodo.7670749>.
28. I. Angeli and K. P. Marinova, *At. Data Nucl. Data Tables* **99**, 69 (2013).
29. G. Rodrigues, P. Indelicato, J. Santos, P. Patté, and F. Parente, *At. Data Nucl. Data Tables* **86**, 117 (2004).

Спектроскопия высокого разрешения кристалла ErCrO_3 : новый фазовый переход?

А. Яблунский⁺¹⁾, Е. П. Чукалина*, Л. Х. Йин^{×1)}, М. Н. Попова^{*2)}

⁺Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия

*Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

[×]Key Laboratory of Materials Physics, Institute of Solid State Physics, HFIPS, Chinese Academy of Sciences, 230031 Hefei, China

Поступила в редакцию 14 июня 2023 г.

После переработки 20 июня 2023 г.

Принята к публикации 20 июня 2023 г.

Впервые зарегистрированы инфракрасные спектры поглощения кристалла ErCrO_3 в области $f-f$ переходов в ионе Er^{3+} . Анализ температурно-зависимых спектров высокого разрешения позволил обнаружить, помимо особенностей при температурах магнитного упорядочения $T_N = 133$ К и спинопереориентационного перехода $T_{SR} = 9.3$ К, ступеньку при $T' = 47$ К на температурных зависимостях характеристик спектральных линий. Эта особенность может быть связана как с известным ранее фазовым переходом, так и с локальными изменениями кристаллической структуры. Форма линий при гелиевых температурах свидетельствует о наличии в кристалле ErCrO_3 дополнительных позиций для ионов Er^{3+} . Предположительно, это позиции вблизи неконтролируемых примесей, входящих в кристалл в процессе его выращивания раствором-расплавным методом и формирующих области с искаженной структурой, ответственные за возникновение поляризации.

DOI: 10.31857/S1234567823140033, EDN: gyblym

Введение. Кристаллы с общей формулой ABX_3 и структурой перовскита обладают многими привлекательными свойствами, которые делают их интересными как для физики твердого тела, так и для приложений. Классический перовскит – минерал CaTiO_3 ; он был открыт в 1839 г. Густавом Розе в Уральских горах и назван в честь минералога-любителя и министра этого региона в Российской империи Льва Перовского. Традиционно российские ученые уделяют большое внимание фундаментальным и прикладным исследованиям различных перовскитов. Назовем только несколько работ последних лет [1–10].

Редкоземельные (РЗ) ортохромиты RCrO_3 с искаженной структурой перовскита – интересные мультиферроики. Эти соединения кристаллизуются в ромбической сингонии, в centrosymmetric пространственной группе $Pbnm$ [11]. Точечная группа симметрии позиции редкоземельного иона $R^{3+} - C_s$. Изучение РЗ ортохромитов началось во второй половине 20 в. Было показано, что соединения RCrO_3 с “тяжелыми” редкими землями $R = \text{Ho}, \text{Er}, \text{Yb}, \text{Lu}$, Y демонстрируют слабый ферромагнетизм ни-

же температур антиферромагнитного упорядочения ($T_N = 111\text{--}140$ К) [12–15] и полярный порядок ниже 350–516 К [15–17]. Природа возникновения электрической поляризации в centrosymmetric кристаллах RCrO_3 активно обсуждается в литературе [15–22]. В работах [18, 21, 22] был проведен симметричный анализ и показано, что в элементарной ячейке RCrO_3 возможно формирование электрических дипольных моментов, локализованных вблизи ионов Cr^{3+} и упорядоченных антисегнетоэлектрически. Во внешнем электрическом поле может реализоваться сегнетоэлектрическая фаза. Однако в экспериментах на монокристаллах YCrO_3 [16] и ErCrO_3 [17] однородного сегнетоэлектрического упорядочения в интервале температур 5–350 К ни в одном из направлений кристалла не было обнаружено, но наблюдалась электрическая поляризация, индуцируемая локальными полярными областями. Существование областей с искаженной структурой в РЗ ортохромитах было выявлено методами рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения [16, 17], локального γ -зонда [23], анализа парных функций распределения на основе нейтронных данных (ссылка в [15] на неопубликованную работу). Согласно работам [16, 17], локальные полярные области структурной природы формируются вблизи примесных

¹⁾А. Jablunovskis, L. H. Yin.

²⁾e-mail: popova@isan.troitsk.ru

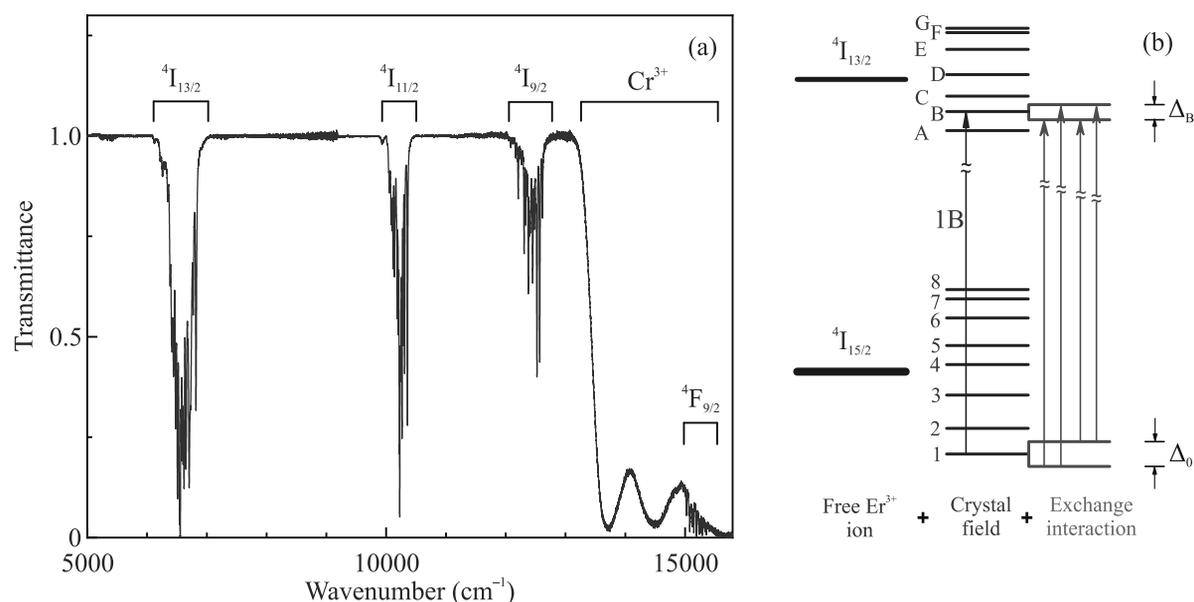


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Спектр пропускания кристалла ErCrO_3 при температуре 150 К. Отмечены переходы с уровней основного состояния мультиплета ${}^4I_{15/2}$ на возбужденные мультиплеты ${}^4I_{13/2}$, ${}^4I_{11/2}$, ${}^4I_{9/2}$, ${}^4F_{9/2}$. Широкие полосы относятся к поглощению в ионах Cr^{3+} . (б) – Схема уровней иона Er^{3+} в кристалле и оптических переходов. Δ_0 и Δ_B – расщепления крамерсовских дублетов иона Er^{3+} в магнитоупорядоченном состоянии кристалла

ионов, входящих в кристалл в процессе выращивания раствор-расплавным методом. Внешнее поле выстраивает дипольные моменты именно этих областей параллельно друг другу.

Несмотря на ряд невыясненных вопросов, РЗ ортохромиты рассматриваются как перспективные материалы для различного рода практических приложений. Магнитоэлектрический эффект [20], высокая температура Нееля, значительный магнитокалорический эффект при низких температурах [24, 25] создают перспективу возможного применения соединений RCrO_3 для создания приборов магнитного охлаждения, в качестве твердотельных топливных элементов, термистров с отрицательным температурным коэффициентом и фотовольтаиков [26].

Исследования свойств ортохромита эрбия проводилось различными экспериментальными методами, такими как рентгеновский анализ [16, 17], γ -спектроскопия с возмущенными угловыми корреляциями [23], нейтронная дифракция [12], мессбауэровская [27] и оптическая [28–32] спектроскопии, спектроскопия комбинационного рассеяния света [33], изучение температурных зависимостей намагниченности [20, 34–36], теплоемкости [37, 38], диэлектрической проницаемости [15, 17, 19, 20, 36] и индуцированной внешним электрическим полем поляризации [17, 19, 20] как на поликристаллах, так и на

монокристаллах, в том числе во внешнем магнитном поле. Установлено, что при температуре Нееля $T_N = 133$ К магнитные ионы Cr^{3+} антиферромагнитно упорядочиваются в плоскости xy под углом 55° к оси x и с небольшой ферромагнитной компонентой вдоль оси z (магнитная структура $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$ в обозначениях Берто) [12]. При дальнейшем понижении температуры до $T_{SR} \approx 9$ К происходит спин-переориентационный фазовый переход Морина в антиферромагнитную спиновую конфигурацию $\Gamma_1(A_x, G_y, C_z)$ [12, 30, 36, 38]. В порошковых образцах переход наблюдался при существенно больших температурах (16.8 К [12], 20 К [20, 34]) или отсутствовал [37]. Помимо двух общепризнанных фазовых переходов, некоторые исследователи интерпретируют слабую особенность на температурной зависимости магнитной восприимчивости как дополнительный фазовый переход при $T = 6.5$ К, объясняя его упорядочением ионов Er^{3+} [34, 36].

Ранее спектроскопические данные по ErCrO_3 были получены исключительно для мультиплетов иона Er^{3+} в видимой области спектра с разрешением не лучше 0.7 см^{-1} [28, 32]. При этом спектральные линии имели ширину не меньше $3\text{--}4 \text{ см}^{-1}$. Такая большая ширина линий может быть обусловлена передачей возбуждения на лежащие ниже по энергии уровни ионов хрома. Можно ожидать, что линии $f\text{--}f$ пе-

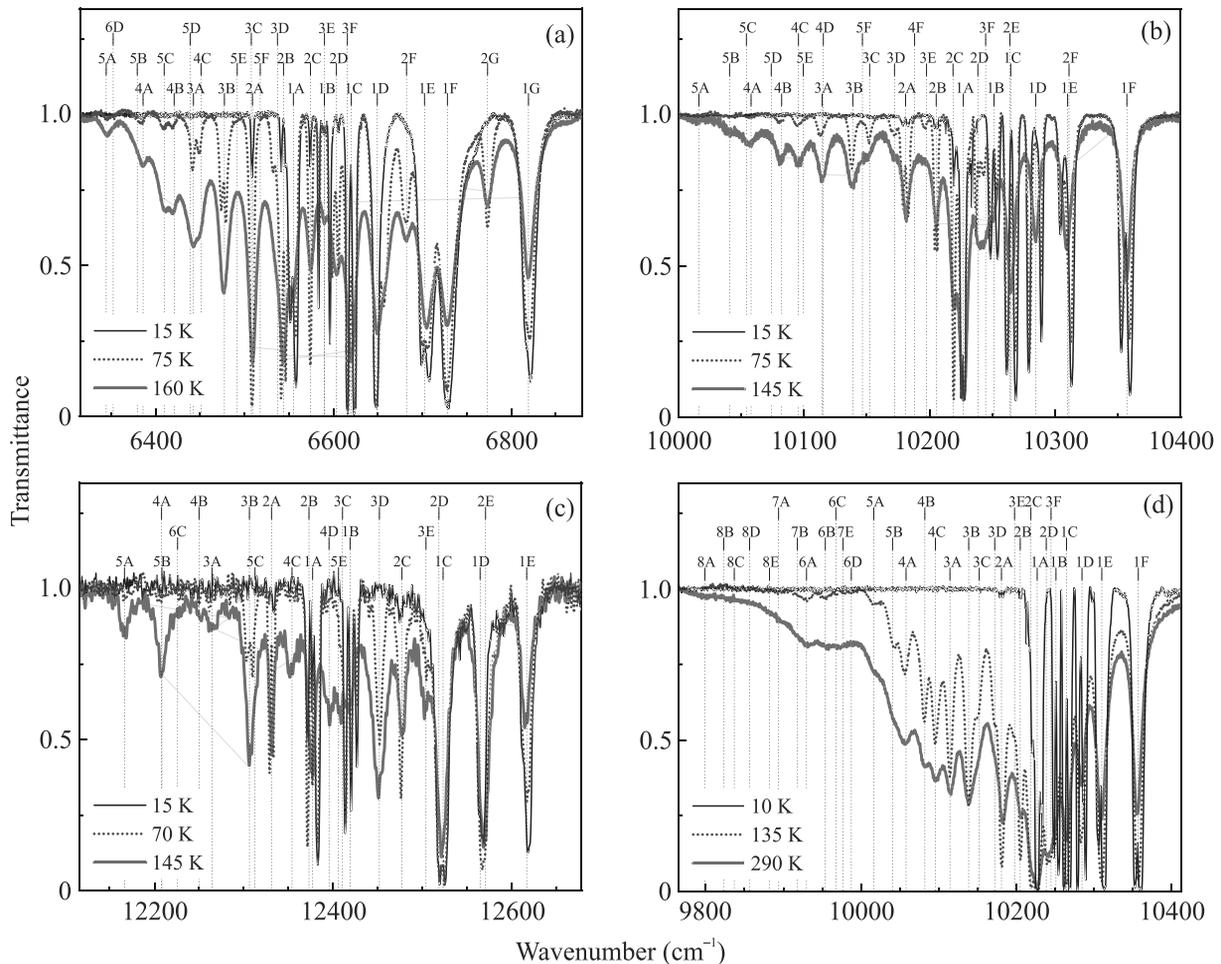


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры пропускания EgCrO_3 при трех температурах в области переходов со штарковских уровней основного мультиплета ${}^4I_{15/2}$ на штарковские уровни возбужденных мультиплетов: (а) – ${}^4I_{13/2}$, (б), (д) – ${}^4I_{11/2}$, (с) – ${}^4I_{9/2}$ для образцов толщиной (а), (б), (с) – 0,07 мм и (д) – 0,3 мм

редов в инфракрасной области будут значительно уже. В настоящей работе получены спектры высокого разрешения кристалла EgCrO_3 в инфракрасной области, в широком диапазоне температур и проведен детальный анализ формы спектральных линий.

Эксперимент. Монокристаллы EgCrO_3 выращивали раствор-расплавным методом. Исходные материалы Eg_2O_3 , Cr_2O_3 , PbF_2 , PbO и V_2O_5 были смешаны в молярном соотношении 1 : 1 : 8 : 2 : 1, помещены в платиновый тигель и нагреты до 1200 °С. При такой температуре смесь находилась в течение 4 дней. После этого смесь медленно охлаждали до 1000 °С со скоростью 5 °С/ч, а затем печь выключали. Подробно эта процедура описана в работе [36]. Из выращенных монокристаллов были приготовлены пластинки с толщинами от 0,05 до 0,3 мм. Спектры пропускания были зарегистрированы на фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker IFS 125HR в спектральной

области 5000–16000 cm^{-1} с разрешением до 0,05 cm^{-1} . Температурные измерения проводились в диапазоне 4–300 К с помощью криостата замкнутого цикла CryoMech ST 403.

Экспериментальные результаты. На рисунке 1а показан обзорный спектр пропускания кристалла EgCrO_3 во всей исследуемой спектральной области. Узкие линии, сгруппированные в области ~6500, 10200, 12300 и 15400 cm^{-1} , соответствуют переходам со штарковских уровней основного мультиплета ${}^4I_{15/2}$ на штарковские уровни возбужденных мультиплетов ${}^4I_{13/2}$, ${}^4I_{11/2}$, ${}^4I_{9/2}$ и ${}^4F_{9/2}$. Широкая полоса поглощения, край которой находится в области ~13000 cm^{-1} , обусловлена ионами Cr^{3+} .

Энергетические уровни свободного иона Eg^{3+} с полным моментом J в кристаллическом поле EgCrO_3 расщепляются на $(2J + 1)/2$ крамеровских дублета с волновыми функциями, преобразующимися по

неприводимому представлению G_{34} точечной группы симметрии C_s . Крамерсовское вырождение снимается при магнитом упорядочении ErCrO_3 , при этом каждый штарковский уровень G_{34} расщепляется на два подуровня (см. схему рис. 1b).

Рисунок 2а демонстрирует спектры пропускания кристалла ErCrO_3 в области инфракрасных переходов ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$, ${}^4I_{11/2}$, ${}^4I_{9/2}$ при разных температурах. Принятые обозначения спектральных линий расшифрованы на рис. 1b. При понижении температуры спектральные линии сужаются. Интенсивность в максимуме некоторых из них увеличивается. Эти линии соответствуют переходам с основного уровня на штарковские уровни возбужденных мультиплетов (1A, 1B, 1C, ...). Наблюдаются также линии, интенсивность которых уменьшается при понижении температуры. Они относятся к переходам с возбужденных штарковских уровней основного мультиплета ${}^4I_{15/2}$, населенность которых уменьшается при понижении температуры в соответствии с распределением Больцмана. При достаточно низкой температуре остаются только линии, соответствующие переходам с основного уровня, они отражают штарковскую структуру возбужденных мультиплетов. Линии, интенсивность которых уменьшается при понижении температуры (2A, 3B и т.п.), позволяют выяснить энергетическую структуру основного мультиплета ${}^4I_{15/2}$.

Экспериментальные значения энергий штарковских уровней мультиплетов в парамагнитной фазе кристалла ErCrO_3 совместно с литературными данными сведены в табл. 1.

При температурах ниже температуры Нееля $T_N = 133\text{ K}$ спектральные линии расщепляются, в общем случае на четыре компоненты (см. рис. 1b). На рисунке 3а показана эволюция обменного расщепления линии 1F перехода из основного состояния на верхний уровень в мультиплете ${}^4I_{11/2}$. Наблюдаются только две компоненты, что связано, как будет показано ниже, с малым обменным расщеплением конечного уровня перехода. Температурная зависимость расщепления линии $\Delta(T)$ представлена на рис. 3b. Хорошо виден фазовый переход II рода при температуре 133 K, соответствующий магнитному упорядочению. Скачкообразное увеличение $\Delta(T)$ при температуре 9.3 K связано со спин-переориентационным переходом I рода. Полученные значения температур этих фазовых переходов хорошо согласуются с литературными данными [12, 28, 30, 36, 38]. Ниже температуры T_{SR} , в частности, при $T = 6.5\text{ K}$, где согласно работам [34, 36] происходит второй спин-переориентационный

Таблица 1. Энергии E (cm^{-1}) штарковских уровней иона Er^{3+} в ErCrO_3 в парамагнитной фазе ($T \sim 150\text{ K}$) и сравнение с литературными данными

${}^{2S+1}L_J$		E (cm^{-1})	E (cm^{-1}) [28]	E (cm^{-1}) [29]
${}^4I_{15/2}$	1	0	0	0
	2	46.0	46	45.8
	3	112.4	114	113.4
	4	169.0	173	170.1
	5	210.5		211.2
	6	297.1		
	7	333.1		
	8	428.0		
${}^4I_{13/2}$	A	6555.0		
	B	6590.0		
	C	6620.0		
	D	6649.0		
	E	6702.0		
	F	6728.0		
	G	6819.0		
${}^4I_{11/2}$	A	10 227.0		
	B	10 251.0		
	C	10 265.0		
	D	10 285.0		
	E	10 310.0		
	F	10 357.0		
${}^4I_{9/2}$	A	12 377.0		
	B	12 419.0		
	C	12 523.0		
	D	12 564.0		
	E	12 617.0		
${}^4F_{9/2}$	A	15 191.0	15 197	
	B	15 233.0	15 241	
	C	15 302.0	15 308	
	D	15 332.0	15 337	
	E	15 403.0	15 407	

переход, никаких особенностей на температурных зависимостях характеристик спектральных линий не наблюдалось.

Кроме известных фазовых переходов, на зависимости $\Delta(T)$ видна особенность при $T' = 47\text{ K}$ (см. рис. 3b). В увеличенном масштабе она показана на рис. 4а. Эта особенность повторяется в температурных зависимостях расщеплений других линий и на других образцах. Ее удалось зарегистрировать благодаря высокой точности определения волновых чисел в фурье-спектрометре по сравнению с решеточными приборами, с помощью которых были выпол-

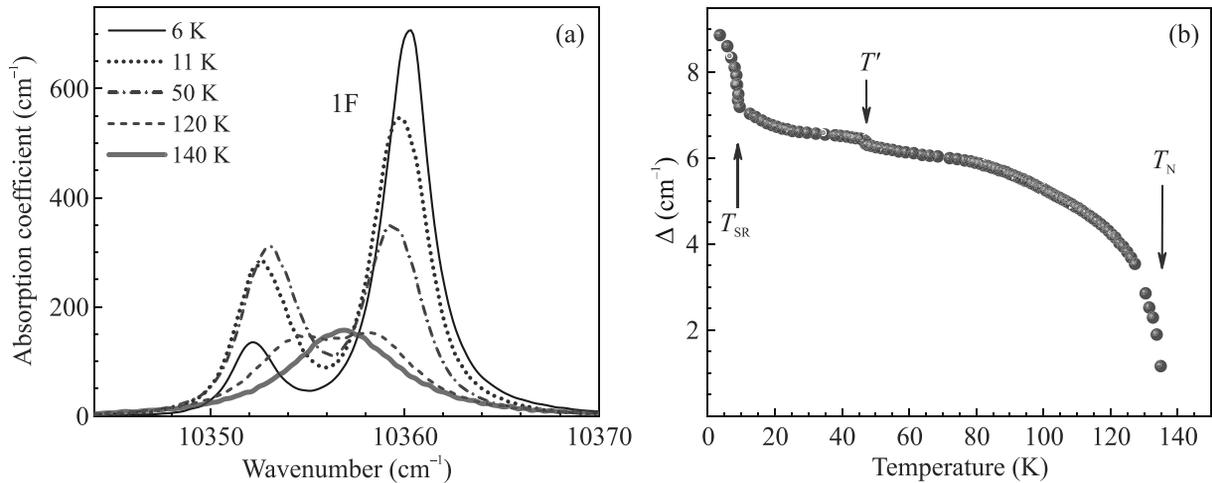


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Обменное расщепление линии 1F в переходе ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ в ионах Er^{3+} при нескольких температурах; (б) – Температурная зависимость обменного расщепления $\Delta(T)$ спектральной линии 1F

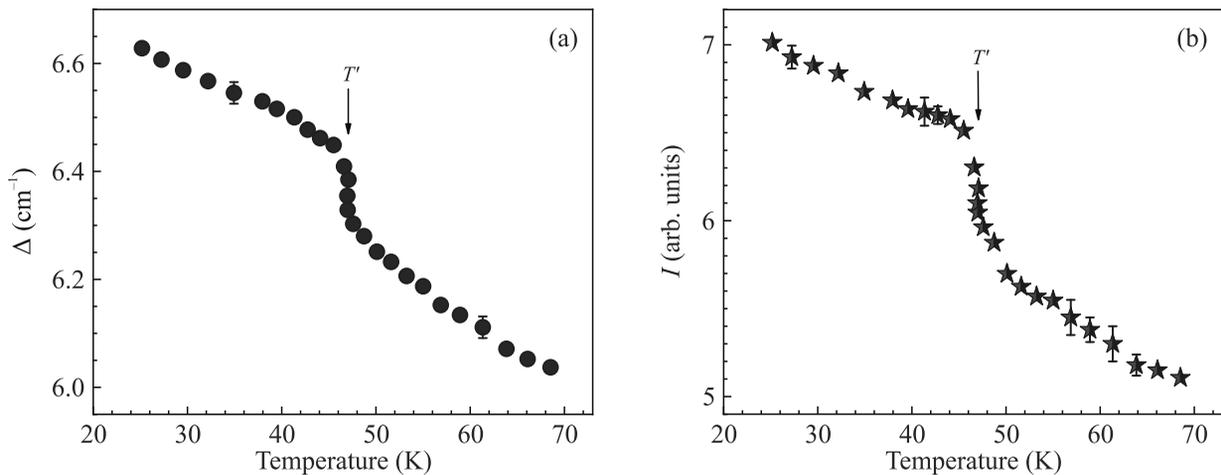


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости спектральных характеристик линии 1F в области перехода ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ в ионах Er^{3+} : (а) – обменное расщепление линии $\Delta(T)$, (б) – интегральная интенсивность линии $I(T)$

нены предшествующие спектроскопические работы [28, 29]. Рисунок 4b демонстрирует температурную зависимость интегральной интенсивности $I(T)$ линии 1F. Зависимости $\Delta(T)$, $I(T)$ строились на основании результатов подгонки спектрального контура суммой двух контуров Фойгта. Скачкообразное изменение величин $\Delta(T)$, $I(T)$ характерно для фазового перехода I рода. Следует отметить, что в работе [20] при измерениях пироэлектрического тока в порошковом образце ErCrO_3 наблюдался скачок индуцированной полем электрической поляризации $P(T)$ вблизи температуры 50 K, близкой к температуре T' . Однако поскольку поляризующее электрическое поле выключалось при близкой температуре ($T_{\text{off}} = 55$ K) [20], для уверенной регистрации особенности на зависимости $P(T)$ измерения следовало бы

повторить с другим значением T_{off} . В единственной известной нам работе, где представлена температурная зависимость теплоемкости ErCrO_3 в этой области температур, интервал между точками на зависимости $C(T)$ составлял 10 K [34], так что возможный фазовый переход I рода при $T' = 47$ K не мог быть зарегистрирован.

Обсудим возможную природу наблюдаемой особенности при $T' = 47$ K в зависимостях характеристик спектральных линий – $\Delta(T)$, $I(T)$. Изменение обменных расщеплений крамерсовских дублетов иона Er^{3+} и интенсивностей линий переходов между расщепленными компонентами возможно по двум причинам: (1) из-за изменения направления эффективного магнитного поля, действующего на ион эрбия со стороны упорядоченных ионов хрома, т.е. из-

за спин-переориентации; (2) из-за структурных изменений в окрестности ионов эрбия. Согласно нейтронным измерениям, магнитная структура ErCrO_3 не меняется в интервале температур 20–77 К [12]. Мы полагаем, что вблизи температуры ~ 50 К происходят незначительные изменения локального окружения ионов Er^{3+} .

Как говорилось во Введении, одна из гипотез появления поляризации в centrosymmetric соединении базируется на предположении о существовании полярных областей искаженной структуры вблизи примесных ионов, входящих в кристалл в процессе роста раствор-расплавным методом [16, 17]. Кристаллическое поле для ионов эрбия в таких областях должно искажаться, что будет приводить к смещению штарковских уровней, а следовательно, и спектральных линий. Для проверки реализации такого сценария мы провели детальный анализ формы линий в низкотемпературных спектрах.

На рисунке 5 в качестве примера приведена расщепленная спектральная линия 1В в области перехода ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ в ионах Er^{3+} при нескольких низких температурах, захватывающих область температуры спин-переориентационного фазового перехода.

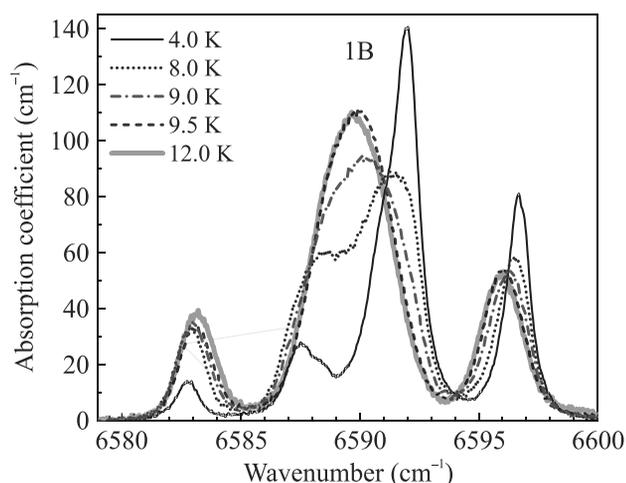


Рис. 5. (Цветной онлайн) Линия поглощения 1В в области перехода ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ в ионах Er^{3+} в кристалле ErCrO_3 при разных температурах вблизи температуры спин-переориентационного перехода

Выше температуры $T_{\text{SR}} = 9.3$ К линия расщеплена на три практически эквидистантные компоненты. Это свидетельствует о почти равном обменном расщеплении основного Δ_0 и возбужденного Δ_B состояний. Около $T_{\text{SR}} = 9.3$ К в интервале $\Delta T \sim 2$ К происходит резкое переигрывание интенсивностей компонент спектральной линии, а спектр при 9.0 К представляет собой суперпозицию спектров при темпе-

ратурах выше и ниже T_{SR} , что является характерным для спин-переориентационного перехода I рода. Моделирование формы линии при $T = 12$ К четырьмя контурами Фойгта в соответствии со схемой на рис. 1b, показанное на рис. 6a, дает значения обменных расщеплений $\Delta_0(12 \text{ К}) = 7.2 \text{ см}^{-1}$ и $\Delta_B(12 \text{ К}) = 5.5 \text{ см}^{-1}$. Из анализа обменного расщепления линии 1В при $T = 4$ К получены следующие значения обменных расщеплений: $\Delta_0(4 \text{ К}) = 9.3 \text{ см}^{-1}$ и $\Delta_B(4 \text{ К}) = 4.7 \text{ см}^{-1}$ и (рис. 6b). Полученные значения величин расщепления основного крамерсовского дублета иона Er^{3+} в магнитных фазах Γ_4 и Γ_1 кристалла ErCrO_3 согласуются с литературными данными [28].

Хорошее согласие результирующего контура с наблюдаемой формой линии 1В при 4 К достигается только при учете четырех дополнительных компонент, площадь которых обозначена сплошной серой заливкой на рис. 6b, со следующими значениями расщеплений: $\Delta_0^*(4 \text{ К}) = 7.6 \text{ см}^{-1}$ и $\Delta_B^*(4 \text{ К}) = 5.3 \text{ см}^{-1}$. Таким образом, имеются по крайней мере две неэквивалентные позиции для ионов Er^{3+} , в то время как в ненарушенной кристаллической структуре ErCrO_3 в магнитной фазе Γ_1 имеется только одна позиция.

Следует обратить внимание на тот факт, что кристаллы ErCrO_3 были выращены раствор-расплавным методом с флюсом, в состав которого входили PbF_2 и PbO . В процессе роста в присутствии кислорода в кристалл входят ионы Pb^{2+} и Pb^{4+} ; общее количество свинца, определенное флюоресцентным рентгеновским методом для YCrO_3 , составляло 1.5% [16]. В соответствии с соотношением ионных радиусов r , ионы свинца могут замещать эрбий (в восьмерной координации, согласно [39], $r(\text{Er}^{3+}) = 1.004 \text{ \AA}$, $r(\text{Pb}^{4+}) = 0.94 \text{ \AA}$, $r(\text{Pb}^{2+}) = 1.29 \text{ \AA}$). При этом такие дефекты изменяют кристаллическое поле для близких к ним ионов эрбия, что приводит к смещению штарковских уровней и изменению величин магнитных g -факторов. Мы считаем, что второй центр – это ионы эрбия рядом с примесями свинца, входящего в кристалл в процессе роста раствор-расплавным методом. Относительное интегральное поглощение “дефектных” эрбиевых центров в переходе 1В (${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$) – 0.28 (рис. 6b). Если считать, что вклад в это поглощение дают ионы Er^{3+} , находящиеся в первых двух координационных сферах вокруг дефекта (таких ионов 18), то при концентрации дефектов 1.5% их относительный вклад в поглощение составит 0.27, что практически совпадает с экспериментальной цифрой 0.28. Отметим, однако, что это очень грубая оценка, она не учитывает

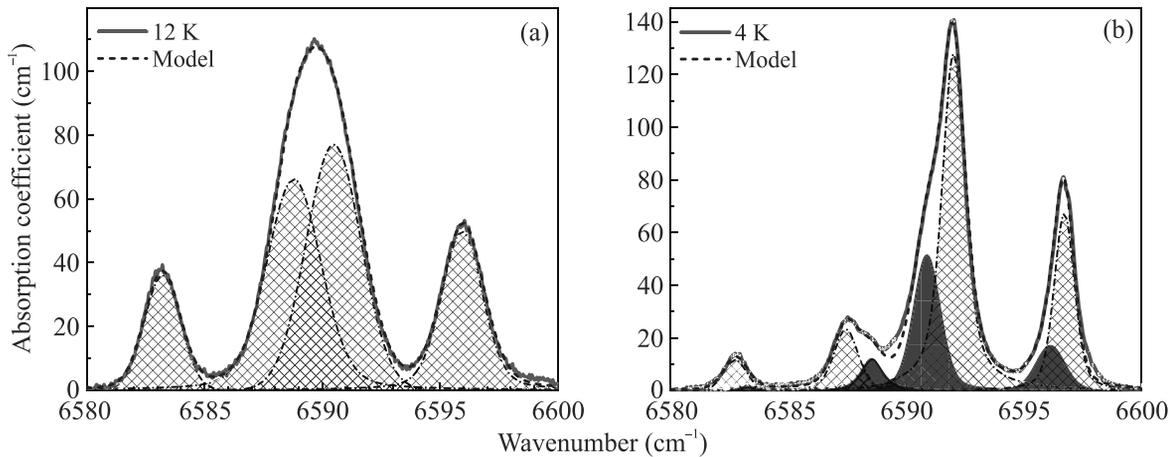


Рис. 6. (Цветной онлайн) Линия поглощения 1В в области перехода ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ в ионах Er^{3+} в кристаллах ErCrO_3 : (а) – при $T = 12\text{ К}$ и (б) – при $T = 4\text{ К}$. Приведены элементарные контура Фойгта, моделирующими сложную форму линии 1В (штрих-пунктирная линия) и результирующий контур (пунктирная линия)

возможное изменение вероятностей переходов для поглощающих центров, расположенных вблизи дефектов. Предположительно именно в этих локальных областях с искаженной структурой нарушается антисегнетоэлектрический и возникает полярный порядок.

Заключение. В работе зарегистрированы инфракрасные спектры высокого разрешения монокристаллов ErCrO_3 в температурном диапазоне 5–300 К в области $f-f$ оптических переходов в ионах Er^{3+} . Построена энергетическая схема штарковских уровней иона Er^{3+} в ErCrO_3 . По температурным зависимостям расщеплений линий поглощения $\Delta(T)$ определены температуры магнитного упорядочения (133 К) и спин-переориентационного фазового перехода (9.3 К). Эти значения температур хорошо согласуются со значениями T_N и T_{SR} для монокристаллов, найденными другими методами. Найденны значения обменного расщепления основного кримерсовского дублета иона Er^{3+} в двух спиновых конфигурациях: $\Delta_0(\Gamma_4) = 7.2\text{ см}^{-1}$ и $\Delta_0(\Gamma_1) = 9.3\text{ см}^{-1}$ при 12 и 4 К, соответственно. Обнаружена особенность в виде ступеньки при температуре $T' = 47\text{ К}$ на температурных зависимостях обменных расщеплений $\Delta(T)$ и интенсивностей $I(T)$ спектральных линий. Эта особенность связана, вероятно, с изменением локальных искажений кристаллической решетки. Сложная форма линий поглощения при температурах $T < T_{SR}$ говорит о присутствии в исследуемых кристаллах ErCrO_3 дополнительных позиций для ионов Er^{3+} , соответствующих, как мы считаем, ионам эрбия вблизи неконтролируемых приме-

сей, входящих в кристалл в процессе его выращивания раствор-расплавным методом и формирующих области с искаженной структурой, ответственные за возникновение поляризации.

В заключение заметим, что исследование тонкоструктурных спектров продуктивно как для неорганических, так и органических материалов [40, 41].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FFUU-2022-0003 Госзадания ИСАН).

1. Т. А. Шайхулов, А. Р. Сафина, К. Л. Станкевич, А. В. Матасов, М. П. Темиряева, Д. А. Виннике, В. Е. Живулине, С. А. Никитов, Письма в ЖЭТФ **117**(8), 620 (2023).
2. В. Д. Седых, В. С. Русаков, Т. В. Губайдулина, Физика твердого тела **65**(4), 629 (2023).
3. Л. Э. Гончарь, Оптика и спектроскопия **131**(4), 502 (2023).
4. А. С. Москвин, ЖЭТФ **159**(4), 607 (2021).
5. Б. Х. Ханнанов, Е. И. Головенчиц, В. А. Санина, Письма в ЖЭТФ **115**(4), 262 (2022).
6. Э. А. Петухова, В. В. Хартон, В. В. Кведер, Физика твердого тела **65**(1), 63 (2023).
7. Д. Г. Гулевич, А. А. Ткач, И. Р. Набиев, В. А. Кривенков, П. С. Самохвалов, Журнал технической физики **93**(2), 256 (2023).
8. Е. В. Васинович, А. С. Москвин, Физика твердого тела **65**(6), 928 (2023).
9. М. С. Кузнецова, М. Н. Батаев, М. А. Чукаев, Н. Д. Ростовцев, С. Ю. Вербин, И. В. Игнатъев, В. Ю. Давыдов, А. Н. Смирнов, И. А. Елисеев,

- Е. В. Колобкова, Оптика и спектроскопия **130**(11), 1739 (2022).
10. В. В. Оглобличев, В. И. Изюров, Ю. В. Пискунов, А. Г. Смольников, А. Ф. Садыков, С. А. Чупраков, С. С. Дубинин, С. В. Наумов, А. П. Носов, Письма в ЖЭТФ **114**(1), 24 (2021).
11. S. Geller and E. A. Wood, Acta Crystallogr. **9**, 563 (1956).
12. E. F. Bertaut and J. Mareschal, Solid State Commun. **5**, 93 (1967).
13. R. M. Hornreich, S. Shtrikman, B. M. Wanklyn, and I. Yaeger, Phys. Rev. B **13**, 4046 (1976).
14. N. Shamir, H. Shaked, and S. Shtrikman, Physica B **90**, 211 (1977).
15. J. R. Sahu, C. R. Serrao, N. Ray, U. V. Waghmare, and C. N. R. Rao, J. Mater. Chem. **17**, 42 (2007).
16. В. А. Санина, Б. Х. Ханнанов, Е. И. Головенчиц, М. П. Щеглов, Физика твердого тела **61**(1), 95 (2019).
17. В. А. Санина, Б. Х. Ханнанов, Е. И. Головенчиц, М. П. Щеглов, Физика твердого тела **61**(3), 501 (2019).
18. А. К. Зvezdin, З. В. Гареева, С. М. Чен, Физика Металлов и Металловедение **123**, 693 (2022).
19. K. R. S. Preethi Meher, A. Wahl, A. Maignan, C. Martin, and O. I. Lebedev, Phys. Rev. B **89**, 144401 (2014).
20. B. Rajeswaran, D. I. Khomskii, A. K. Zvezdin, C. N. R. Rao, and A. Sundaresan, Phys. Rev. B **86**, 214409 (2012).
21. Z. Gareeva, A. Zvezdin, K. Zvezdin, and X. Chen, Materials **15**, 574 (2022).
22. A. K. Zvezdin, Z. V. Gareeva, and X. M. Chen, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 385801 (2021).
23. G. N. P. Oliveira, P. R. Rodrigues, J. G. Correia, J. P. E. Araujo, and A. M. L. Lopes, Crystals **13**, 54 (2023).
24. L. H. Yin, J. Yang, X. C. Kan, W. H. Song, J. M. Dai, and Y. P. Sun, J. Appl. Phys. **117**, 133901 (2015).
25. M. Shao, S. Cao, S. Yuan, J. Shang, B. Kang, B. Lu, and J. Zhang, Appl. Phys. Lett. **100**, 222404 (2012).
26. Y. Zhu, J. Xia, S. Wu et al. (Collaboration), iScience **25**, 104111 (2022).
27. M. Eibschütz, B. L. Cohen, and K. W. West, Phys. Rev. **178**, 572 (1969).
28. A. Hasson, R. M. Hornreich, and Y. Komet, Phys. Rev. B **12**, 5051 (1975).
29. R. Courths and S. Hufner, Z. Physik B **22**, 245 (1975).
30. R. S. Meltzer and H. W. Moos, J. Appl. Phys. **41**, 1240 (1970).
31. R. S. Meltzer, Phys. Rev. B **2**, 2398 (1970).
32. K. Toyokawa, S. Kurita, and K. Tsushima, Phys. Rev. B **19**, 274 (1979).
33. D. Ullrich, R. Courths, and C. Von Grundherr, Physica B + C **89**, 205 (1977).
34. Y. Su, J. Zhang, L. Li, B. Li, Y. Zhou, D. Deng, Z. Chen, and S. Cao, Appl. Phys. A **100**, 73 (2010).
35. L. Holmes, M. Eibschütz, and L. G. Van Uitert, J. Appl. Phys. **41**, 1184 (1970).
36. L. H. Yin, J. Yang, P. Tong, X. Luo, C. B. Park, K. W. Shin, W. H. Song, J. M. Dai, K. H. Kim, X. B. Zhu, and Y. P. Sun, J. Mater. Chem. C **4**, 11198 (2016).
37. C. Veyret, J. B. Ayasse, J. Chaussy, J. Mareschal, and J. Sivadriere, J. Phys. (Paris) **31**, 607 (1970).
38. M. Eibschütz, L. Holmes, J. P. Maita, and L. G. van Uitert, Solid State Commun. **8**, 1815 (1970).
39. R. D. Shannon, Acta Crystall. A **32**, 751 (1976).
40. В. В. Компанец, К. Р. Каримуллин, И. А. Васильева, А. В. Наумов, Известия РАН. Серия физическая **84**(3), 351 (2020).
41. Н. Л. Наумова, И. А. Васильева, И. С. Осадько, А. В. Наумов, Оптика и спектроскопия **98**(4), 585 (2005).

Плазмоны в полосе с анизотропным двумерным электронным газом, сильно экранированным металлическим затвором¹⁾

Д. А. Родионов^{+,*2)}, И. В. Загордннев⁺

⁺Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 17 апреля 2023 г.

После переработки 5 июня 2023 г.

Принята к публикации 5 июня 2023 г.

В последнее время растет интерес к анизотропным двумерным электронным системам и к плазменным колебаниям в них. В работе теоретически проанализированы плазмоны в полосе с двумерным электронным газом, поверхность Ферми которого является эллипсом, и с близко расположенным металлическим затвором, который экранирует поля двумерного газа. В пределе сильной экранировки задача о собственных плазменных модах такой системы решена аналитически, и найдены частоты и затухание плазменных мод с учетом анизотропии, магнитного поля и эффектов электромагнитного запаздывания. Показано, что в таком пределе фундаментальной модой является краевой магнитоплазмон с линейным законом дисперсии, причем его частота, затухание и скорость не зависят от магнитного поля, а длина локализации вблизи края обратно пропорциональна магнитному полю. Квадрат частоты остальных мод складывается из квадрата частоты плазменных мод без магнитного поля и квадрата циклотронной частоты с коэффициентом, который не зависит от ориентации тензора проводимости по отношению к краям полосы, но при учете эффектов электромагнитного запаздывания зависит от главных компонент тензора эффективной массы.

DOI: 10.31857/S1234567823140045, EDN: gyvjms

Плазмоны – коллективные колебания электронов – в двумерных (2D) электронных системах (ЭС) изучаются с середины прошлого столетия [1]. Они, как правило, определяют резонансный отклик электронной системы на внешнее электрическое поле в достаточно чистых образцах и поэтому представляют интерес не только для фундаментальной физики, но также и для приложений в области детектирования и генерации электромагнитного излучения, в том числе в терагерцовой и субтерагерцовой области частот [2–5]. В 2D ЭС их частоту и другие характеристики можно контролировать внешним магнитным полем, перпендикулярным к плоскости системы, а также с помощью металлического электрода (затвора). Кроме того, в последнее время активно обсуждается дополнительная возможность управления направлением распространения плазмонов в 2D ЭС с анизотропией проводимости [6–14]. Среди таких систем стоит выделить квантовые ямы на основе напряженного AlAs, которые, с одной стороны, обладают высокой подвижностью при низких (“гелиевых”) темпера-

турах, а с другой стороны, анизотропия в них очень чувствительна к деформации квантовой ямы [15–19].

Поверхностью Ферми электронов в объемном кристалле AlAs являются три одинаковых эллипсоида, продольная и поперечная массы которых $1.1m_0$ и $0.2m_0$, где m_0 – масса свободного электрона. При определенных толщинах и направлениях роста квантовых ям, например в направлении [001], электронами заполняются только две одинаковые долины в плоскости ямы [15]. При этом небольшое растяжение/сжатие квантовой ямы в плоскости ямы приводит к существенному различию в заполнении этих долин и относительно легко реализуется ситуация, когда заполнена лишь одна из долин. В этом случае поверхность Ферми является эллипсом. Именно такая ситуация будет предполагаться ниже.

Плазменные колебания в анизотропных системах в теории в силу сложности, как правило, анализируются для неограниченной системы. Однако, на практике плазменные колебания возбуждают в неоднородных образцах, например, в латерально ограниченных (полоски, диски), в которых теория плазменных колебаний резко усложняется даже при простейшем описании 2D ЭС с помощью локального закона Ома и проводимости Друде. При этом свой-

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

²⁾e-mail: rodionov.da@phystech.edu

ства системы с краем могут существенно отличаться от неограниченной системы. Так, вблизи края существуют краевые плазменные возбуждения [20–22], частота которых обычно ниже других (“объемных”) мод. Край играет важную роль при поглощении и излучении электромагнитных волн [23]. В данной работе будут проанализированы собственные плазменные колебания в 2D ЭС в полосе, сильно экранированной затвором, и найдены аналитические выражения для их частоты и затухания.

Пусть в вакууме в плоскости $z = 0$ располагается полоса 2D электронного газа шириной W . Направим ось y вдоль полосы, а ось x поперек, см. рис. 1. На

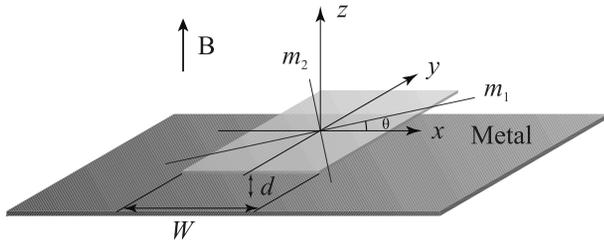


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение исследуемой системы. Полоса шириной W с двумерным электронным газом располагается на расстоянии d над металлической пластиной. Система помещена в постоянное однородное магнитное поле, вектор индукции \mathbf{B} которого направлен перпендикулярно полосе. Тензор эффективных масс с главными осями m_1 и m_2 повернут на произвольный угол θ по отношению к краям полосы

расстоянии d от полосы в плоскости $z = -d$ находится бесконечная идеально проводящая металлическая пластина (проводимость которой сколь угодно велика). Вдоль оси z направлено внешнее однородное магнитное поле с величиной индукции B . Диагональные компоненты тензора эффективных масс в главных осях равны m_1 и m_2 . Динамическую проводимость 2D ЭС выберем в анизотропной модели Друде [24]. Время столкновительной релаксации носителей τ для простоты будем считать не зависящим от энергии и направления. Пусть θ – угол между осью x и главной осью тензора эффективных масс с компонентой m_1 . При произвольной ориентации осей тензора эффективных масс проводимость в системе единиц СГС в выбранных декартовых координатах имеет следующий вид:

$$\sigma = S^T \begin{pmatrix} \frac{(\gamma - i\omega) \frac{n_s e^2}{m_1}}{(\gamma - i\omega)^2 + \omega_c^2} & \frac{-\omega_c \frac{n_s e^2}{\sqrt{m_1 m_2}}}{(\gamma - i\omega)^2 + \omega_c^2} \\ \frac{\omega_c \frac{n_s e^2}{\sqrt{m_1 m_2}}}{(\gamma - i\omega)^2 + \omega_c^2} & \frac{(\gamma - i\omega) \frac{n_s e^2}{m_2}}{(\gamma - i\omega)^2 + \omega_c^2} \end{pmatrix} S, \quad (1)$$

где $\omega_c = eB/c\sqrt{m_1 m_2}$ – циклотронная частота, e , n_s – заряд и двумерная концентрация электронов, $\gamma = 1/\tau$ – обратное время релаксации электронов, а матрица поворота S на угол θ имеет стандартный вид:

$$S = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Для описания плазменных колебаний с учетом эффектов электромагнитного запаздывания нужно решать полную систему уравнений Максвелла с локальным законом Ома и проводимостью (1). В силу симметрии системы электромагнитное поле, плотность тока и возмущение плотности заряда искались пропорциональными $e^{iq_y y - i\omega t}$ с комплексной частотой ω и действительным волновым вектором q_y вдоль полосы. Действительная часть ω описывает частоту плазменных колебаний, а мнимая – их затухание. Систему уравнений Максвелла можно свести к одному интегро-дифференциальному уравнению на плотность тока $\mathbf{j}(x)$ с довольно сложным ядром логарифмического типа, подобно тому как это делается в случае отсутствия затвора [25]. Подробный вывод представлен в дополнительных материалах.

Будем считать, что расстояние до затвора d много меньше всех характерных размеров, таких как ширина полосы и длина волны плазмона. Такая ситуация часто встречается в реальных системах [4, 26, 27]. В этом пределе ядро интегро-дифференциального уравнения значительно упрощается и превращается в дельта-функцию Дирака [28–30]. Такой предел фактически соответствует локальному взаимодействию электронов: из-за близости полосы 2D ЭС к затвору электроны в системе взаимодействуют только со своими зарядами изображения в металле. В результате уравнение для тока становится исключительно дифференциальным:

$$\mathbf{j}(x) = i \frac{4\pi d \sigma}{\omega} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c^2} & iq_y \frac{\partial}{\partial x} \\ iq_y \frac{\partial}{\partial x} & -q_y^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \end{pmatrix} \mathbf{j}(x). \quad (2)$$

Это уравнение для фурье компонент было также получено в работе [31]. Решая это дифференциальное уравнение, найдем дисперсионное уравнение для собственных плазменных колебаний и соответствующее распределение плотности тока. Полученные моды, помимо волнового вектора q_y , характеризуются еще целым числом n длин полуволн, укладывающихся на ширине полосы.

Прежде чем перейти к анализу результатов отметим, что в рассматриваемом пределе локального

взаимодействия у всех плазменных мод отсутствующую радиационные потери. Физически это связано с тем, что даже для мод, дисперсия которых проходит выше дисперсии света, при малых расстояниях d излучение 2D ЭС подавляется излучением, отраженным от металла [32]. Поэтому плазменное затухание в рассматриваемом нами случае определяется столкновительными потерями, т.е. $(\text{Im } \omega_n(q_y) \sim \gamma)$, и в “чистом” пределе ($\gamma \rightarrow 0$) частота плазмона действительна.

Рассмотрим отдельно фундаментальную моду с $n = 0$, которая качественно отличается от остальных, потому что описывает краевой магнитоплазмон, ток которого локализован вблизи одного из краев и направлен строго вдоль полосы, т.е. $j_x(x) = 0$. Дисперсионное уравнение этой моды дается выражением (см. дополнительные материалы):

$$\rho_{yy} + i \frac{4\pi d}{\omega} \left(q_y^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) = 0, \quad (3)$$

где ρ_{yy} – диагональная компонента тензора удельного сопротивления, которая в рассматриваемой модели проводимости не зависит от магнитного поля:

$$\rho_{yy} = (\sigma^{-1})_{yy} = \frac{m_1 \cos^2 \theta + m_2 \sin^2 \theta}{n_s e^2} (\gamma - i\omega).$$

Так как в дисперсионное уравнение (3) магнитное поле также не входит, то и частота магнитоплазмона не будет зависеть от магнитного поля. Магнито-дисперсия может появиться в случае, если диагональная компонента тензора удельного сопротивления по каким-то причинам будет зависеть от магнитного поля. Кроме того, в следующем порядке малости по расстоянию d следует ожидать (слабой) отрицательной магнито-дисперсии, как, например, это происходит у краевых магнитоплазмонов в полуплоскости в изотропном случае [29].

Из дисперсионного уравнения (3) получаем частоту краевого магнитоплазмона:

$$\omega_0(q_y, \theta) = \sqrt{v(\theta)^2 q_y^2 - \frac{\gamma^2}{4} \left(1 - \frac{v(\theta)^2}{c^2} \right)^2} - i \frac{\gamma}{2} \left(1 - \frac{v(\theta)^2}{c^2} \right), \quad (4)$$

где введены параметры

$$v_i^2 = c^2 \left(\frac{m_i c^2}{4\pi n_s e^2 d} + 1 \right)^{-1}, \quad i = 1, 2$$

и $v(\theta)^2 = v_1^2 v_2^2 / (v_1^2 \cos^2 \theta + v_2^2 \sin^2 \theta)$. Введенные таким образом величины v_i и $v(\theta)$ имеют размерность

скорости, причем их значения не превышают скорость света в вакууме. Отношение скоростей $v_{1,2}$ к скорости света c можно интерпретировать как степень влияния эффектов электромагнитного запаздывания: в квазистатическом пределе оно много меньше единицы, а при сильном запаздывании – близко к единице.

В сильных магнитных полях ток и плотность заряда прижимаются к одному из краев полосы (в зависимости от направления магнитного поля), при этом длина локализации l в чистом пределе определяется следующим выражением:

$$l = \frac{v_1 v_2}{\sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}} \sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}} v(\theta) \omega_c}. \quad (5)$$

Видно, что с увеличением электромагнитного запаздывания, т.е. с увеличением отношения $v_{1,2}/c$, длина локализации увеличивается. В силу рассматриваемого предела локального взаимодействия, подразумевающего малость расстояния d по сравнению с другими характерными размерами в системе, следует ожидать, что полученное выражение (5) справедливо при условии $l \gg d$.

Выражение для затухания краевого магнитоплазмона при условии $\text{Re } \omega_n(q_y, \theta) \gg |\text{Im } \omega_n(q_y, \theta)|$ в соответствии с (3) имеет простой вид $\text{Im } \omega_0(q_y, \theta) = -\gamma (1 - v(\theta)^2/c^2)/2$. Затухание уменьшается с увеличением роли электромагнитного запаздывания, так как потери энергии происходят только за счет столкновительного рассеяния электронов в 2D ЭС, но все больше энергии запасается в бездиссипативных электромагнитных полях, окружающих 2D ЭС.

Обсудим теперь остальные моды с числами $n = 1, 2, 3, \dots$, которые мы условно называем объемными. Для высокочастотных плазменных колебаний можно получить следующие выражения для частоты

$$(\text{Re } \omega_n(q_y, \theta))^2 = q_y^2 v(\theta)^2 + \left(\frac{n\pi}{W} \right)^2 \frac{v_1^2 v_2^2}{v(\theta)^2} + \omega_c^2 \left(1 - \frac{v_1^2}{c^2} \right) \left(1 - \frac{v_2^2}{c^2} \right), \quad (6)$$

и затухания

$$\text{Im } \omega_n(q_y, \theta) = -\frac{\gamma}{2} \left[2 - \frac{v_1^2 + v_2^2}{c^2} - \frac{q_y^2 v(\theta)^2 \left(1 + \frac{v(\theta)^2 - v_1^2 - v_2^2}{c^2} \right)}{(\text{Re } \omega_n(q_y, \theta))^2} - \frac{\left(\frac{n\pi}{W} \right)^2 \frac{v_1^2 v_2^2}{v(\theta)^2} \left(1 - \frac{v(\theta)^2}{c^2} \right)}{(\text{Re } \omega_n(q_y, \theta))^2} \right]. \quad (7)$$

Из равенства (6) можно видеть, что квадрат частоты этих мод определяется суммой трех вкладов. Первые два связаны с поперечными и продольными колебаниями плазмона в полосе соответственно, а последний с наличием магнитного поля. Обратим внимание на то, что при наличии анизотропии квантование поперечной компоненты волнового вектора существенно отличается от изотропного случая, подробнее см. дополнительные материалы. В коротковолновом пределе, т.е. когда слагаемое с продольной компонентой волнового вектора q_y вносит основной вклад в частоту, плазменная дисперсия (6) становится линейной по волновому вектору, а фазовая и групповая скорости плазмона сравниваются, принимая значение $v(\theta)$. Что касается магнитного вклада в частоту, в изотропных 2D ЭС учет электромагнитного запаздывания приводит к уменьшению частоты циклотронного резонанса [33, 26]. Этот же результат сохраняется и в анизотропной системе, причем это уменьшение не зависит от угла ориентации тензора эффективных масс θ .

Теперь обсудим затухание объемных мод. В изотропной системе ($v_1 = v_2 \equiv v$) затухание в отсутствие магнитного поля не зависит ни от номера моды n , ни от продольного волнового вектора q_y и определяется как $\text{Im } \omega_n(\omega_c = 0) = -\gamma(1 - v^2/c^2)/2$. В сильных магнитных полях оно удваивается, т.е. $\text{Im } \omega_n(\omega_c \rightarrow \infty) = 2 \text{Im } \omega_n(\omega_c = 0)$. В анизотропной системе мнимая часть частоты в сильном магнитном поле имеет схожий с изотропным случаем вид

$$\text{Im } \omega_n(\omega_c \rightarrow \infty) = -\gamma \left(1 - \frac{v_1^2 + v_2^2}{2c^2} \right). \quad (8)$$

Как можно видеть, затухание магнитоплазмонов вовсе не зависит от угла θ . Обратим внимание на поведение добротности плазменных колебаний $\text{Re } \omega_n(q_y, \theta) / |\text{Im } \omega_n(q_y, \theta)|$ в сильных магнитных полях. В изотропной системе добротность стремится к значению ω_c/γ , не зависящему от величины электромагнитного запаздывания, в то время как анизотропная система “чувствует” усиление роли эффектов электромагнитного запаздывания, и добротность плазменных колебаний в ней уменьшается.

На рисунке 2 для примера представлен график зависимости частоты двух нижайших плазменных мод в квантовой яме на основе напряженного AlAs от волнового вектора q_y в отсутствие магнитного поля для углов ориентации $\theta = 0$ и $\pi/2$. На рисунке 3. изображена магнитодисперсия для этой же системы. Видно, что магнитодисперсия краевой моды плоская, а частота объемных мод стремится к циклотронному резонансу, уменьшенному за счет эффектов электро-

магнитного запаздывания. Между краевым магнитоплазмоном и первой объемной модой существует щель, как и в изотропном случае, однако, при наличии анизотропии ее величина дополнительно зависит от угла ориентации θ .

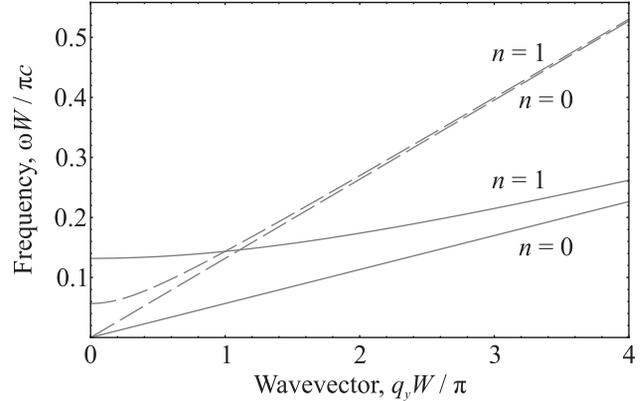


Рис. 2. Зависимость действительной части частоты плазменных мод от волнового вектора q_y вдоль полосы в отсутствие магнитного поля. Сплошные линии соответствуют углу ориентации $\theta = 0$, а пунктирные – $\theta = \pi/2$. Плазменная мода $n = 0$ лежит ниже моды $n = 1$. Концентрация электронов $n_s = 5 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$, расстояние до затвора $d = 0.02W$. Массы $m_1 = 0.2m_0$ и $m_2 = 1.1m_0$, где m_0 – масса свободного электрона

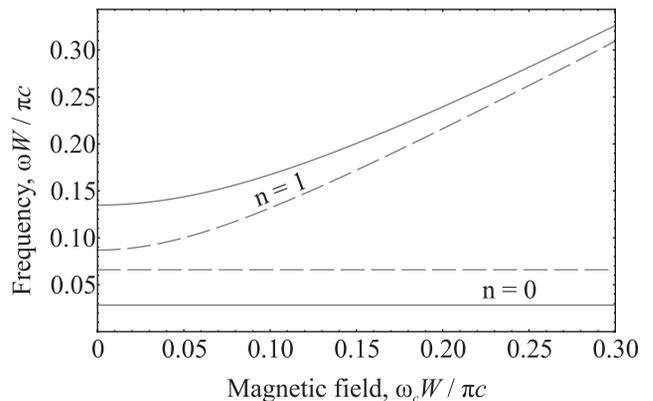


Рис. 3. Зависимость действительной части частоты плазменных мод с числами $n = 0$ и $n = 1$ от магнитного поля. Сплошные линии соответствуют углу ориентации $\theta = 0$, а пунктирные – $\theta = \pi/2$. Концентрация электронов $n_s = 5 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$, расстояние до затвора $d = 0.02W$, волновой вектор $q_y = 0.01 \times 2\pi/d$. Массы $m_1 = 0.2m_0$ и $m_2 = 1.1m_0$, где m_0 – масса свободного электрона

Таким образом, в работе рассмотрены свойства двумерных плазменных колебаний в 2D электронной системе сильно экранированной металлическим затвором, т.е. в пределе локального взаимодействия,

который позволяет существенно упростить анализ латерально ограниченных систем. На примере полосы с анизотропной проводимостью проанализированы плазменные моды, в том числе и краевые, с учетом внешнего магнитного поля и эффектов электромагнитного запаздывания. Найдено аналитическое выражение для частот и затуханий всех плазменных мод. Показано, что фундаментальной модой в такой системе является краевой магнитоплазмон, частота и затухание которого не зависят от магнитного поля, а длина его локализации обратно пропорциональна магнитному полю. Кроме того, интересной особенностью остальных мод является то, что в сильных магнитных полях их частоты и затухания не зависят от угла ориентации.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “Базис” (грант # 21-1-5-133-1).

Авторы выражают благодарность В. А. Волкову и А. А. Заболотных за ценные обсуждения.

1. F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18**, 546 (1967).
2. W. Кнап, Y. Deng, S. Rumyantsev, and M. S. Shur, Appl. Phys. Lett. **81**, 4637 (2002).
3. V. M. Muravev and I. V. Kukushkin, Appl. Phys. Lett. **100**, 082102 (2012).
4. D. A. Bandurin, D. Svintsov, I. Gayduchenko et al. (Collaboration), Nat. Commun. **9**, 5392 (2018).
5. I. V. Zagorodnev, A. A. Zabolotnykh, D. A. Rodionov, and V. A. Volkov, Nanomaterials **13**, 975 (2023).
6. Ch. Wang, G. Zhang, Sh. Huang, Y. Xie, and H. Yan, Adv. Opt. Mater. **8**, 1900996 (2020).
7. S. Ahn and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **103**, L041303 (2021).
8. F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, and A. Ramasubramaniam, Nature Photon. **8**, 899 (2014).
9. T. Low, A. Chaves, J. D. Caldwell, A. Kumar, N. X. Fang, P. Avouris, T. F. Heinz, F. Guinea, L. Martín-Moreno, and F. Koppens, Nature Mater. **16**, 182 (2017).
10. D. N. Basov, M. M. Fogler, and F. J. García de Abajo, Science **354**, aag1992 (2016).
11. A. Agarwal, M. S. Vitiello, L. Viti, A. Cupolillo, and A. Politano, Nanoscale **10**, 8938 (2018).
12. A. A. Sokolik, O. V. Kotov, and Y. E. Lozovik, Phys. Rev. B **103**, 155402 (2021).
13. T. Low, R. Roldán, H. Wang, F. Xia, P. Avouris, L. Martín Moreno, and F. Guinea, Phys. Rev. Lett. **113**, 106802 (2014).
14. A. Nemilentsau, T. Low, and G. Hanson, Phys. Rev. Lett. **116**, 066804 (2016).
15. M. Shayegan, E. P. De Poortere, O. Gunawan, Y. P. Shkolnikov, E. Tutuc, and K. Vakili, Phys. Status Solidi B **243**, 3629 (2006).
16. Md. Shafayat Hossain, M. K. Ma, Y. J. Chung, S. K. Singh, A. Gupta, K. W. West, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, R. Winkler, and M. Shayegan, Phys. Rev. Lett. **130**, 126301 (2023).
17. V. M. Muravev, A. R. Khisameeva, V. N. Belyanin, I. V. Kukushkin, L. Tiemann, C. Reichl, W. Dietsche, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **92**, 041303(R) (2015).
18. A. R. Khisameeva, A. V. Shchepetilnikov, V. M. Muravev, S. I. Gubarev, D. D. Frolov, Yu. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, C. Reichl, L. Tiemann, W. Dietsche, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **97**, 115308 (2018).
19. A. R. Khisameeva, V. M. Muravev, and I. V. Kukushkin, Appl. Phys. Lett. **117**, 093102 (2020).
20. D. B. Mast, A. J. Dahm, and A. L. Fetter, Phys. Rev. Lett. **54**, 1706 (1985).
21. В. А. Волков, С. А. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **42**, 450 (1985).
22. А. А. Заболотных, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ **104**, 424 (2016).
23. E. Nikulin, D. Mylnikov, D. Bandurin, and D. Svintsov, Phys. Rev. B **103**, 085306 (2021).
24. B. Lax, H. J. Zeiger, and R. N. Dexter, Physica **20**, 818 (1954).
25. S. A. Mikhailov and N. A. Savostianova, Phys. Rev. B **71**, 035320 (2005).
26. Н. Д. Семенов, В. М. Муравьев, И. В. Андреев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **114**, 669 (2021).
27. V. M. Muravev, C. Jiang, I. V. Kukushkin, J. H. Smet, V. Umansky, and K. von Klitzing, Phys. Rev. B **75**, 193307 (2007).
28. А. В. Чаплик, ЖЭТФ **62**, 746 (1972).
29. V. A. Volkov and S. A. Mikhailov, ZhETF **94**, 217 (1988).
30. А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **101**, 602 (2015).
31. D. Jin, L. Lu, Z. Wang, C. Fang, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, L. Fu, and N. X. Fang, Nat. Commun. **7**, 13486 (2016).
32. D. A. Rodionov and I. V. Zagorodnev, Phys. Rev. B **106**, 235431 (2022).
33. A. A. Zabolotnykh and V. A. Volkov, Phys. Rev. B **103**, 125301 (2021).

Топологическая память на многосвязных планарных магнитных наноэлементах¹⁾

К. Л. Метлов²⁾

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, 283048 Донецк, Россия

Институт вычислительной математики РАН им. Г. И. Марчука, 119333 Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 апреля 2023 г.

После переработки 6 июня 2023 г.

Принята к публикации 8 июня 2023 г.

Предложена схема кодирования набора битовых строк в планарных магнитных наноэлементах с отверстиями. Получены аналитические выражения для соответствующих распределений намагниченности с точностью до гомотопии, даны конкретные примеры для двусвязного и трехсвязного случаев. Обсуждаются энергетические барьеры, защищающие эти состояния. По сравнению с набором односвязных наноэлементов такой же общей связности, наноэлементы с отверстиями могут хранить больше информации благодаря возможности задания ссылок между отдельными битами.

DOI: 10.31857/S1234567823140057, EDN: gyzifh

Современная концепция беговой памяти [1] широко используется в скирмионике [2] (на ферромагнитных [3] и, в последнее время, антиферромагнитных скирмионах [4]). Информация в ней кодируется как последовательность магнитных доменных границ/скирмионов в нанополосе. Здесь мы обобщим эту идею на многосвязный случай. Возможность последовательного считывания бит при этом теряется, но состояние элемента все же можно оценить по его частотной характеристике, как это продемонстрировано в [5].

Кодирование является топологическим в том смысле, что записанная информация устойчива к непрерывным деформациям (при выполнении граничных условий) распределения намагниченности. Скирмионная беговая память также топологически защищена, но описанная ниже схема позволяет (для связности > 1) хранить больше информации.

Известно, что состояния намагниченности в бесконечном двумерном ферромагнетике разбиваются на топологические классы [6]. Распределения одного класса эквивалентны с точностью до непрерывной деформации (гомотопии), а преобразование между распределениями разных классов требует создания сингулярности в векторном поле намагниченности, которая имеет бесконечную энергию в континуальной модели ферромагнетика. Классы можно пронумеровать целыми числами, а поле

намагниченности представить при помощи рациональных функций комплексной переменной [6]. Топологический индекс (номер класса) – общее количество пар вихрь-антивихрь в векторном поле (число скирмионов). В конечных наноэлементах могут присутствовать неполные пары (дополнительный вихрь [7] или антивихрь [8]), из-за чего число скирмионов становится полуцелым.

Топологическая защита делает память более надежной, но есть и ограничение, что алгебра целочисленного (или полуцелого) топологического индекса является абелевой. Имеет значение только общее количество вихрей/антивихрей внутри элемента. Если он может содержать от 0 до n скирмионов, то топологически защищено в нем только $\simeq \log_2 n$ бит информации. Обычный способ решения этой проблемы состоит в том, чтобы сделать магнитную среду многосвязной, используя множество (скажем, N) отдельных элементов, содержащих (или нет) вихри/скирмионы. Тогда алгебра топологического индекса перестает быть абелевой, так как помимо общего числа скирмионов становится важным – где именно они расположены. Так можно представить около $(1 + n)^N$ различных состояний. Рассмотренная здесь альтернатива состоит в том, чтобы использовать один наноэлемент с отверстиями. Он также является многосвязным с неабелевым топологическим индексом. Но, помимо хранения самих бит, в таком наноэлементе можно представить и ссылки между ними, что еще больше расширяет набор доступных топологически защищенных состояний.

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

²⁾e-mail: metlov@donfti.ru

В качестве отправной точки возьмем (нормированную на $\mu_0 M_S^2$) плотность энергии ферромагнетика в континуальном приближении

$$e = L_E^2 \sum_{i=X,Y,Z} |\nabla m_i(\mathbf{r})|^2 + \mathbf{h}_D(\mathbf{r}, \{\mathbf{m}(\mathbf{r})\}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $L_E = \sqrt{C/(\mu_0 M_S^2)}$ – обменная длина, $C = 2A$ – обменная жесткость, μ_0 – проницаемость вакуума, M_S – намагниченность насыщения, $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r})/M_S$ – нормированный вектор локальной намагниченности в точке $\mathbf{r} = \{X, Y, Z\}$, $\nabla = \{\partial/\partial X, \partial/\partial Y, \partial/\partial Z\}$ – оператор градиента и $\mathbf{h}_D = \mathbf{H}_D/M_S$ – размагничивающее поле, созданное распределением намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$. Рассматриваемые наноэлементы имеют форму (конечного) цилиндра, основание которого может содержать отверстия. Плоскость $OX-OY$ декартовой системы координат выберем параллельной основаниям цилиндра, а ось OZ перпендикулярной им. Предположим, что элемент достаточно тонок, чтобы распределение намагниченности можно было считать однородным по его толщине ($\partial \mathbf{m}/\partial Z = 0$). Стороной наноэлемента назовем поверхность, параллельную оси OZ и проходящую между основаниями цилиндра вдоль их границы. Многосвязные наноэлементы имеют количество сторон, равное связности основания.

Метастабильные распределения намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$, минимизирующие объемный интеграл от (1), можно приближенно выразить [9] в терминах функции $w(z, \bar{z})$ комплексной переменной $z = X + iY$, $\bar{z} = X - iY$, $i = \sqrt{-1}$, представляя векторы намагниченности фиксированной длины $|\mathbf{m}| = 1$ в виде стереографической проекции $\{m_X + im_Y, m_Z\} = \{2w, 1 - w\bar{w}\}/(1 + w\bar{w})$. Для скирмионов функция w является голоморфной ($\partial w/\partial \bar{z} = 0$). В более общем случае магнитных вихрей (меронов [10]) она выражается через голоморфную функцию $f(z)$ в виде:

$$w(z, \bar{z}) = \begin{cases} f(z)/c_1 & |f(z)| \leq c_1 \\ \sqrt{f(z)/\bar{f}(\bar{z})} & c_1 < |f(z)| < c_2 \\ f(z)/c_2 & |f(z)| \geq c_2 \end{cases}, \quad (2)$$

где вещественные числа c_1 и c_2 задают размеры ядер солитонов. Центрам вихрей (скирмионов) соответствуют нули $f(z)$, а центрам антивихрей (антискирмионов) ее полюса. Чистые скирмионы реализуются при $c_1 = c_2$. В конечном планарном наноэлементе функция $f(z)$ выражается [9] как решение знаменитой задачи Римана–Гильберта о нахождении голоморфной функции без нормальных компонент

к границе области (соответствующей абсолютному минимуму энергии магнитных полюсов на сторонах частицы). Эта (однородная) задача имеет множество решений, которые параметризуются скалярами, связанными с положениями центров вихрей и антивихрей. Для получения конкретного равновесного распределения намагниченности в элементе определенного размера (и из определенного материала) необходимо вычислить полную энергию $E = \iiint e d^3r$ и минимизировать ее по c_1, c_2 , скалярным параметрам в $f(z)$. Такой подход Ритца гораздо проще исходной вариационной задачи.

Все метастабильные магнитные состояния в рамках этой модели состоят из двух типов магнитных вихрей и антивихрей: 1) целых, расположенных внутри наноэлемента и 2) разделенных на две закрепленные на его границе половинки. Предположим пока, что они никогда не смешиваются и что целый вихрь/антивихрь, созданный внутри наноэлемента, остается внутри, а половинки на границе там всегда и остаются.

Тогда информацию можно представить в виде последовательности полувихрей и полуантивихрей на границах многосвязного элемента. Поскольку обход вокруг любой границы должен соответствовать полному (или нескольким) обороту вектора намагниченности, на каждой границе всегда имеется четное число полувихрей и полуантивихрей. Для кодирования произвольных строк удобно представить символ (обозначим его A) парой соседних полувихрей на границе, а анти-символ (\bar{A}) парой полуантивихрей. Тогда на каждой границе (включая внешнюю) можно расположить строку из символов и антисимволов (количество таких строк равно связности элемента). Кроме того, поскольку каждый полувихрь и полуантивихрь на границе представляет собой начало идущей внутрь наноэлемента доменной стенки, есть две возможности: либо стенка начинается и заканчивается на той же границе, либо на другой границе. При помощи стенок второго типа можно представить ссылки между символами, если они начинаются с полувихрей/анти-вихрей из пары, кодирующей символ на одной границе, и заканчиваются на другой паре, кодирующей символ на другой границе.

Этим способом можно хранить битовые строки со ссылками между индивидуальными битами. Благодаря ссылкам, объем информации, содержащейся в многосвязном наноэлементе, больше, чем во множестве отдельных элементов той же общей связности.

Чтобы пояснить приведенную выше схему, рассмотрим пару примеров. Аналитическая функция $f(z)$ со скалярными параметрами, задающими поло-

жения центров магнитных вихрей и антивихрей, может быть выражена через вещественные мероморфные дифференциалы [11] или явно через функции Шоттки–Клейна [12]. При этом нужно учитывать, что в многосвязных наноэлементах существуют дополнительные уравнения связи [13] на положения вихрей и антивихрей, так что не все они независимы.

Рассмотрим двусвязное планарное концентрическое кольцо внешнего радиуса R и внутреннего $r < R$. Мы не будем сейчас минимизировать полную энергию частицы для определения равновесных значений скалярных параметров модели, а выберем их значения произвольно, что соответствует решению задачи с точностью до гомотопии. В таком случае нет смысла задавать и конкретный пространственный масштаб, поэтому расстояния будем измерять в единицах внутреннего радиуса, положив $r = 1$. Рассмотрим конформное отображение $z = Z(u) = \exp(2\pi u/T)$, $T = \pi/\log R$ прямоугольника $0 \leq \text{Re } u \leq 1/2$, $-T/2 \leq \text{Im } u < T/2$ на кольцо $1 \leq |z| \leq R$. Внутренняя граница кольца отображается им на $\text{Re } u = 0$, а внешняя на $\text{Re } u = 1/2$. Распределения намагниченности в таком кольце выражаются при помощи периодической с периодом T вдоль мнимой оси голоморфной функции $f(u)$ (на оригинальной комплексной плоскости $f(z) = f(u)Z'(u)$ при $u = Z^{(-1)}(z)$). Задать ее можно в терминах эллиптических тета-функций [11] через положения нулей (центров вихрей) и полюсов (центров антивихрей). Уравнения связи [13] легко удовлетворить, если разместить вихри и антивихри с фиксированным шагом по азимутальному углу: в точках $\text{Im } u = b_n = iT/2 - iT(n-1)/N$, где $1 \leq n \leq N$ и N – полное количество шагов по азимуту. Точки $u = b_n$ отображаются на внутреннюю границу кольца, а точки $u = a_n = 1/2 + b_n$ – на внешнюю. Введем так же средние точки внутри кольца $c_{n_1 n_2} = 1/4 + (b_{n_1} + b_{n_2})/2$ и несколько сдвинутых (из эстетических соображений) средних точек $d_{n_1 n_2} = 3/20 + c_{n_1 n_2}$, $e_{n_1 n_2} = -1/20 + c_{n_1 n_2}$. Пару соседствующих половинок вихрей на внешней границе обозначим символом A , пару половинок антивихрей на внешней границе – символом \bar{A} , а такие же пары на внутренней границе – символами B и \bar{B} соответственно. Введем 8 функций:

$$F_{n_1 n_2}^{\bar{A}}(u) = \frac{T_1(u - d_{n_1 n_2})T_1(u + \overline{d_{n_1 n_2}})}{T_1(u - a_{n_1})T_1(u - a_{n_2})},$$

$$F_{n_1 n_2}^{\bar{B}}(u) = \frac{T_1(u - e_{n_1 n_2})T_1(u + \overline{e_{n_1 n_2}})}{T_1(u - b_{n_1})T_1(u - b_{n_2})},$$

$$F_{n_1 n_2}^{B\bar{A}}(u) = -\frac{T_1(u - b_{n_1})T_1(u - \overline{b_{n_2}})}{T_1(u - a_{n_1})T_1(u - a_{n_2})},$$

$$F_{n_1 n_2}^{\bar{A}\bar{B}}(u) = -\left(\frac{T_1(u - c_{n_1 n_1})T_1(u + \overline{c_{n_1 n_1}})}{T_1(u - a_{n_1})T_1(u - b_{n_1})}\right) \times \left(\frac{T_1(u - c_{n_2 n_2})T_1(u + \overline{c_{n_2 n_2}})}{T_1(u - a_{n_2})T_1(u - b_{n_2})}\right),$$

$F_{n_1 n_2}^{A\bar{A}} = 1/F_{n_1 n_2}^{\bar{A}}$, $F_{n_1 n_2}^{B\bar{B}} = 1/F_{n_1 n_2}^{\bar{B}}$, $F_{n_1 n_2}^{B\bar{A}} = 1/F_{n_1 n_2}^{\bar{B}\bar{A}}$, $F_{n_1 n_2}^{A\bar{B}} = 1/F_{n_1 n_2}^{\bar{A}\bar{B}}$, где $T_1(u) = \theta_1(u, iT)$ и $\theta_1(\nu, \tau)$ – тета функция Ахиезера [14] (ее можно выразить через тета функцию Якоби как $\theta_1(\nu, \tau) = ie^{-i\pi(\nu-\tau/4)}\theta(\nu + (1-\tau)/2, \tau)$). Перемножая эти функции, можно представить произвольную конфигурацию битовых строк на границах кольца и ссылки между ними. Функции $F^A, F^{\bar{A}}, F^B, F^{\bar{B}}$ кодируют несвязанные биты строк, а функции $F^{A\bar{B}}, F^{\bar{A}\bar{B}}, F^{A\bar{B}}, F^{\bar{A}\bar{B}}$ кодируют пару бит на разных границах кольца, связанные ссылкой. Пример конфигурации, использующий все определенные выше функции, показан на рис. 1. Он соответствует следующему графу символов:

$$\begin{array}{c} \overleftrightarrow{A\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}} \longleftrightarrow \overleftrightarrow{B\bar{B}\bar{B}\bar{B}\bar{B}\bar{B}} \\ \overleftrightarrow{A\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}} \longleftrightarrow \overleftrightarrow{B\bar{B}\bar{B}\bar{B}\bar{B}\bar{B}} \end{array} \quad (3)$$

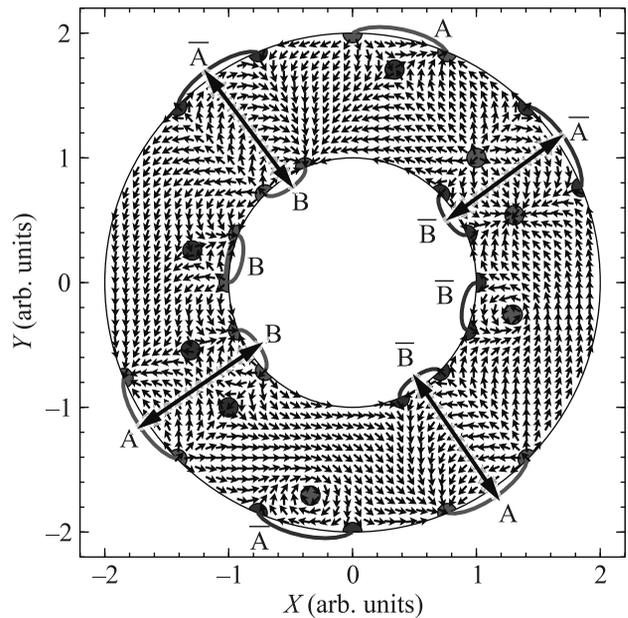


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кольцо $R = 2$ с $N = 16$ в конфигурации $f(u) = iF_{1,2}^B F_{3,4}^{B\bar{A}} F_{5,6}^A F_{7,8}^{\bar{A}\bar{B}} F_{9,10}^{\bar{B}} F_{11,12}^{\bar{B}\bar{A}} F_{13,14}^{\bar{A}} F_{15,16}^{A\bar{B}}$. Круглыми точками отмечены центры вихрей и антивихрей

Записанные строки являются циклическими, что обозначено дополнительными ссылками между их началом и концом. Отметить начало строки можно введя дополнительные центры пиннинга для половинок вихрей на границе. Либо можно просто связать начальные биты строк A и B ссылкой. Тогда метки

на границе не нужны, но возможностей для кодирования информации ссылками становится меньше.

В нанозементах большей связности магнитные состояния можно факторизовать аналогичным образом [12], используя функцию Шоттки–Клейна. Рассмотрим здесь канонические круговые области с вырезанными окружностями. Любые другие области могут быть конформно отображены на одну из таких областей той же связности. Каждое отверстие налагает дополнительное ограничение [13] на положения вихрей и антивихрей, которое также видоизменяется при конформном отображении. Явный вид этих ограничений для связности > 2 еще не известен. К счастью, достаточно управлять только положением и хиральностью вихрей, чтобы построить все необходимые состояния в рамках данной схемы кодирования. Антивихри при этом появляются “автоматически” в правильных положениях, удовлетворяющих всем уравнениям связи. Для этого введем две функции – одну для вихрей внутри наноземента, другую для полувихрей на его границах:

$$B_{z_0}^c(z) = \frac{(\omega(z, z_0)\omega(1/z, 1/z_0))^{-c}}{(\omega(z, 1/\bar{z}_0)\omega(1/z, \bar{z}_0))^{\bar{c}}},$$

$$S_{z_2}^{z_1}(z) = \frac{\omega(z, z_1)}{\omega(z, z_2)}, \quad (4)$$

где $\omega(z, \zeta)$ – функция Шоттки–Клейна [15], z_0 – положение вихря внутри наноземента, параметр c управляет его хиральностью (позволяя вращать все моменты в его окрестности от левостороннего к правостороннему, а также от истока к стоку), z_1 и z_2 – положения полувихрей на границе (внутренней или внешней). Функция ω зависит не только от своих аргументов, но также от связности и формы наноземента. Для односвязной области $\omega = \omega_1 = z - \zeta$. Функцию f , определяющую распределение намагниченности (в рамках модели [9]) в многосвязной области с заданным положением вихрей на границах и в объеме, можно выразить через логарифмическую производную любого произведения P функций (4)

$$\frac{2\pi}{f} = \frac{d \log P}{dz}. \quad (5)$$

Пример такого распределения показан на рис. 2. Обратите внимание, что центральный антивихрь на рисунке не кодирует никакой информации и присутствует лишь потому, что количество антивихрей минус количество вихрей равно [12, 13] связности области минус 2. Изображенное состояние представляет граф

$$\overleftrightarrow{B\bar{B}\bar{B}} \leftrightarrow \overleftrightarrow{C\bar{C}\bar{C}\bar{C}} \leftrightarrow \overleftrightarrow{A\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}\bar{A}}. \quad (6)$$

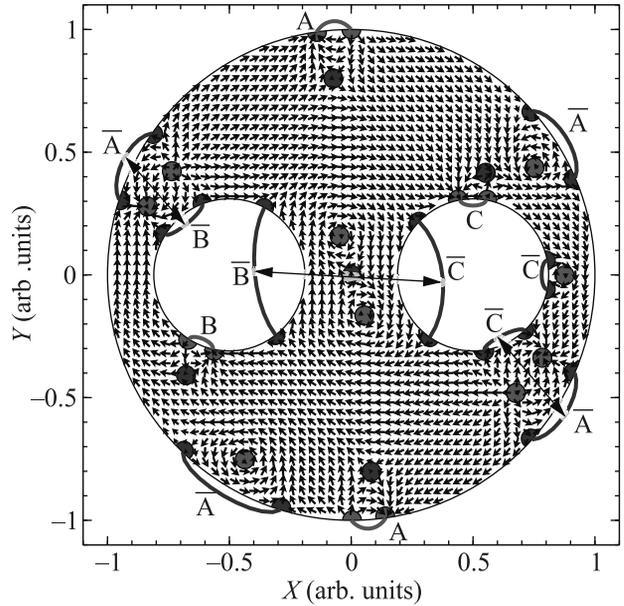


Рис. 2. (Цветной онлайн) Трехсвязный планарный наноземента радиуса $R_3 = 1$ с двумя круговыми отверстиями радиуса $r_3 = 0.3$ с центрами в $Y = 0, X = \pm\delta, \delta = 0.5$. Конфигурация намагниченности определена произведением $P = S_{\delta+r_3e^{i5\pi/9}}^{\delta+r_3e^{i4\pi/9}} S_{-\delta+r_3e^{-i41\pi/72}}^{-\delta+r_3e^{-i49\pi/72}} S_{e^{-i5\pi/11}}^{-i5\pi/11} S_{e^{i6\pi/11}}^{i6\pi/11} B_{0.87}^{0.65i} B_{-0.05+0.16i}^{0.7i} B_{0.05-0.16i}^{0.7i} B_{0.87e^{i\pi/6}}^{-i/2} B_{0.87e^{i4\pi/3}}^{-i/2} B_{0.7e^{-i\pi/12}}^{0.7e^{-i\pi/12}} B_{0.7e^{i11\pi/12}}^{0.7e^{i11\pi/12}} B_{0.85e^{i5\pi/6}}^{0.7e^{i5\pi/6}} B_{0.88e^{i9\pi/10}}^{0.7e^{i9\pi/10}} B_{0.85e^{i\pi/5}}^{0.7e^{i\pi/5}} B_{0.88e^{-i\pi/8}}^{0.7e^{-i\pi/8}}$ и (5)

Нужно отметить, что определенные выше факторизации для магнитных состояний полностью учитывают обменное взаимодействие, задаваемое первым членом в (1). При любых фиксированных положениях вихрей/антивихрей – эти поля намагниченности (в том числе и на рис. 1, 2) удовлетворяют уравнениям Эйлера для функционала обменной энергии. Магнитостатическое взаимодействие учитывается лишь приближенно за счет принципа избегания полюсов.

Поскольку минимизация по скалярным параметрам не проводилась, оба примера показывают распределения намагниченности с точностью до гомотопии (непрерывной деформации). В действительности, если принять во внимание материал и размеры наноземента, вихри и антивихри будут деформироваться и смещаться, прежде чем займут свои равновесные положения. Эта конфигурация может быть рассчитана по методу Ритца на основе приведенных выше пробных функций. Либо, с подходящим выбором начальных положений вихрей и хиральностей, эти функции можно использовать как затравочную конфигурацию для микромагнитного расчета методом конечных элементов.

Если граничные полувихри/полуантивихри остаются на своих границах, а вихри не аннигилируют с антивихрями – нет возможности плавно деформировать векторное поле намагниченности так, чтобы исказить сохраненный граф символов. Ссылки между символами соответствуют магнитным доменам, проходящим от одной границы до другой, число которых тоже топологически защищено. Это потому, что количество полных оборотов вектора намагниченности по любому контуру внутри наноземента сохраняется по отношению ко всем его непрерывным деформациям. При этом, не связанные ссылками символы (пары полувихрей/полуантивихрей на одной границе) не дают полного поворота вектора намагниченности вдоль любого контура, кроме точно лежащего на границе частицы.

Обсудим теперь энергетические барьеры.

Барьер аннигиляции вихря с антивихрем в континуальной модели бесконечен из-за сингулярности векторного поля намагниченности, возникающей при изменении топологического индекса. В реальном дискретном материале этот барьер конечен и определяется балансом обменного и магнитостатического взаимодействий [16]. Он достаточно высок, чтобы доменные стенки с перетяжками (линейные кристаллы вихрей и антивихрей) были статически стабильными при комнатной температуре [17].

Полувихри/полуантивихри не могут просто удалиться от границы (или быть вытолкнуты из наноземента), так как при этом обязательно возникнут боковые магнитные заряды, а их магнитостатическая энергия строго положительна. Соответствующий барьер конечен и достаточно высок, чтобы удерживать боковые полувихри/полуантивихри во встречных доменных стенках (например, вихревых [18]) при комнатной температуре.

Наконец, главный барьер, делающий топологический индекс неабелевым, препятствует слиянию двух полувихрей/полуантивихрей в полный вихрь/антивихрь, входящий внутрь наноземента. Такое слияние возможно без образования боковых магнитных зарядов. Барьер в этом случае формируется за счет взаимодействия торцевых магнитных полюсов в ядрах полувихря/полуантивихря, которые имеют одинаковые полярности и отталкиваются друг от друга. Оценка его высоты дана в Приложении. Известно также, что квазиоднородное состояние намагниченности типа “С” в нанодисках, с подобным балансом энергий, устойчиво в широком диапазоне размеров дисков [19] (что также подтверждается численно и экспериментально при комнатной температуре в работе [20]).

Перечисленные энергетические барьеры существуют не только по отдельности. Недавние эксперименты [21] и моделирование [22] на нанополосках показывают существование и устойчивость при комнатной температуре подобных метастабильных связанных состояний вихрей и антивихрей, включая закрепленные на границе половинки. Односвязная нанополоска является тривиальным предельным случаем настоящего рассмотрения, но энергетические барьеры в ней по существу идентичны. Наблюдения [21, 22] являются убедительным свидетельством того, что описанные состояния с неабелевым топологическим индексом могут быть реализованы на практике.

В целом, энергетический ландшафт сложен и (из-за дальнедействующих магнитостатических сил) зависит от общей формы наноземента. Его точная оценка и оптимизация могут быть интересной задачей для численного моделирования. Чем выше барьеры, тем более длинные цепочки бит может удерживать наноземента.

Подводя итог, можно сказать, что в работе вводится схема кодирования, позволяющая представить набор битовых строк со ссылками в виде магнитных состояний многосвязных планарных наноземента. Благодаря ссылкам, многосвязные наноземента могут содержать больше информации по сравнению с набором изолированных односвязных планарных магнитных наноземента той же общей связности. Построены аналитические выражения для соответствующих распределений намагниченности в двухсвязном и общем многосвязном случаях с точностью до гомотопии. Их применение проиллюстрировано для двух конкретных наборов битовых строк со ссылками в двух- и трехсвязном случаях. Обсуждаются энергетические барьеры, защищающие информационные состояния. Оптимизация этих барьеров может стать интересной задачей для дальнейших исследований.

Автор благодарит за поддержку Российский научный фонд в рамках проекта # 21-11-00325.

Приложение. Барьер деления вихря. Оценим энергетический барьер, препятствующий расщеплению магнитного вихря, подталкиваемого к границе наноземента, на две привязанных к границе половинки. Или наоборот – процессу объединения двух половинок вихря на границе в полный вихрь с его входом внутрь наноземента.

Сама по себе обменная энергия не создает энергетического барьера для вихря на границе, она просто пытается вытолкнуть его из наноземента, чтобы сделать конфигурацию максимально однород-

ной. Торцевые заряды внутри двух ядер полуви́хря/полуантиви́хря имеют одинаковую полярность и создают силу отталкивания, а объемные заряды имеют разную полярность и создают силу притяжения. Зависимости этих двух противоборствующих сил от геометрии нанозлемента (в первую очередь от его толщины), однако, различны, что позволяет создавать и контролировать энергетический барьер.

Для конкретной оценки, рассмотрим простейший случай нанозлемента в форме диска радиуса R и толщины L с конфигурацией намагниченности, описываемой комплексной функцией

$$f(z) = s \left(i(1-t)z + \frac{t-z^2\bar{t}}{2} \right), \quad (\text{A.1})$$

где s управляет размером ядра вихря (в него входит и параметр c_1 из (2)), так что можно положить $c_1 = 1$ и $c_2 \rightarrow \infty$), а $0 \leq t \leq 1$ – смещением его центра и расстоянием между расщепленными полуви́хрями. Эта функция по существу такая же, как и в [9], но с несколько иной параметризацией, позволяющей ограничить изменения размера ядра вихря при изменении параметра t во всем интервале. При $t < 1/2$ вихрь находится внутри диска, при $t = 1/2$ он лежит точно на границе, а при $t > 1/2$ расщепляется на два полуви́хря. (Пример с расщеплением антиви́хря был бы неизбежно более сложным из-за необходимости вводить дополнительные переменные, но энергетический баланс между объемными и торцевыми зарядами половинок антиви́хря аналогичен.)

Полная энергия (1) конфигурации (A.1) в единицах $\mu_0 M_S^2 V$, $V = \pi R^2 L$ является функцией четырех безразмерных параметров: t , s , $g = L/R$ и $\lambda = L/L_E$. Ее зависимость от t , вычисленная прямым численным интегрированием и минимизацией (отдельно для каждого значения t) полной энергии по s , для $g = 0.1$ и $\lambda = 0.8$ показана на рис. 1А. Полное вычисление приведено в дополнительном материале к статье в виде программы для Wolfram Mathematica (см. дополнительные материалы).

Видно, что существуют две устойчивые конфигурации, разделенные энергетическим барьером: одна с магнитным вихрем внутри частицы при $t < 1/2$, другая с двумя полуви́хрями на границе при $t > 1/2$. Высота барьера составляет примерно $\Delta e \approx 0.017$ в безразмерных единицах рис. 1А. Если предположить, что диск изготовлен из материала, подобного пермаллою с намагниченностью насыщения $\mu_0 M_S = 1$ Тл и обменной длиной $L_E = 5.7$ нм, высота барьера равна $\Delta e \mu_0 M_S^2 \pi L_E^3 \lambda^3 / g^2 \approx 4.0 \cdot 10^{-19}$ Дж, что на два порядка выше $k_B T \approx 4.1 \cdot 10^{-21}$ Дж при комнатной температуре.

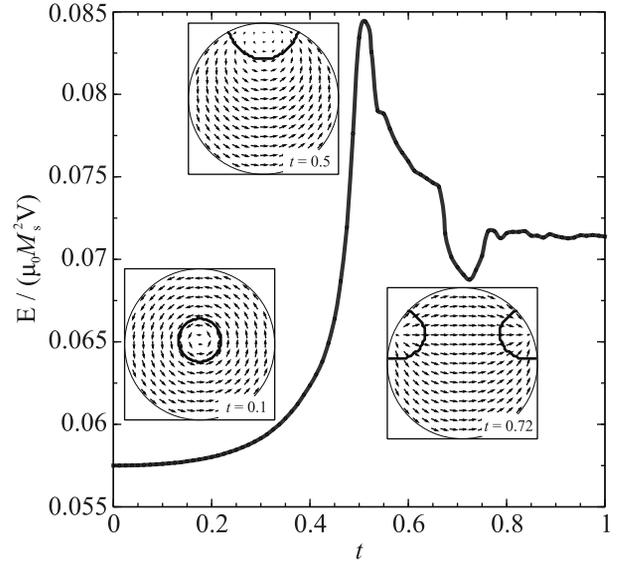


Рис. 1А. (Цветной онлайн) Нормированная полная энергия магнитного диска с $g = L/R = 0.1$ и $\lambda = L/L_E = 0.8$ как функция параметра смещения/разделения вихря t . На вставках показаны распределения намагниченности (A.1) при некоторых значениях t (границы ядер вихрей/полуви́хрей показаны контурами)

1. S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, *Science* **320**, 190 (2008).
2. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 152 (2013).
3. R. Tomasello, E. Martinez, R. Zivieri, L. Torres, M. Carpentieri, and G. Finocchio, *Sci. Rep.* **4**, 6784 (2014).
4. S. Qiu, J. Liu, Y. Chen, X. Qi, and L. Fang, *J. Magn. Magn. Mater.* **554**, 169144 (2022).
5. S. Jain, V. Novosad, F. Fradin, J. Pearson, V. Tiberkevich, A. Slavin, and S. Bader, *Nat. Commun.* **3**, 1330 (2012).
6. A. A. Belavin and A. M. Polyakov, *JETP Lett.* **22**, 245 (1975).
7. A. Wachowiak, J. Wiebe, M. Bode, O. Pietzsch, M. Morgenstern, and R. Wiesendanger, *Science* **298**, 577 (2002).
8. V. L. Mironov, O. L. Ermolaeva, S. A. Gusev, A. Y. Klimov, V. V. Rogov, B. A. Gribkov, O. G. Udalov, A. A. Fraerman, R. Marsh, C. Checkley, R. Shaikhaidarov, and V. T. Petrashov, *Phys. Rev. B* **81**, 094436 (2010).
9. K. L. Metlov, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 107201 (2010).
10. D. J. Gross, *Nucl. Phys. B* **132**, 439 (1978).
11. A. B. Bogatyrev, *Theor. Math. Phys.* **193**, 1547 (2017).
12. A. B. Bogatyrev and K. L. Metlov, *Low Temp. Phys.* **41**, 984 (2015).

13. A. B. Bogatyřev and K. L. Metlov, *Phys. Rev. B* **95**, 024403 (2017).
14. N. Akhiezer, *Elements of the Theory of Elliptic Functions, Translations of mathematical monographs*, American Mathematical Society (1990).
15. D. G. Crowdy and J. S. Marshall, *Comput. Meth. Funct. Theor.* **7**, 293 (2007).
16. M. Potkina, I. Lobanov, H. Jónsson, and V. Uzdin, *J. Magn. Magn. Mater.* **549**, 168974 (2022).
17. E. E. Huber, Jr., D. O. Smith, and J. B. Goodenough, *J. Appl. Phys.* **29**, 294 (1958).
18. A. Bisig, M. Stärk, M.-A. Mawass, C. Moutafis, J. Rhensius, J. Heidler, F. Büttner, M. Noske, M. Weigand, S. Eisebitt, T. Tyliczszak, B. Van Waeyenberge, H. Stoll, G. Schütz, and M. Kläui, *Nat. Commun.* **4**, 2328 (2013).
19. K. L. Metlov and Y. P. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 112506 (2008).
20. M. J. Martínez-Pérez, B. Müller, J. Lin, L. A. Rodriguez, E. Snoeck, R. Kleiner, J. Sesé, and D. Koelle, *Nanoscale* **12**, 2587 (2020).
21. E.-M. Hempe, M. Kläui, T. Kasama, D. Backes, F. Junginger, S. Krzyk, L. J. Heyderman, R. Dunin-Borkowski, and U. Rüdiger, *Phys. Stat. Sol. A* **204**, 3922 (2007).
22. V. Estévez and L. Laurson, *Phys. Rev. B* **91**, 054407 (2015).

A method to reveal and investigate almost 2D Fermi surfaces in layered conductors: Universal resistivity in a parallel magnetic field

A. G. Lebed¹⁾

Department of Physics, University of Arizona, 1118 E. 4-th Street, Tucson, AZ 85721, USA

Landau Institute for Theoretical Physics, 117334 Moscow, Russia

Submitted 30 May 2023
Resubmitted 11 June 2023
Accepted 12 June 2023

DOI: 10.31857/S1234567823140069, EDN: gzfseg

One of the most important questions in area of the quasi-two-dimensional (Q2D) conductors and superconductors is the existence or not of the Fermi surfaces (FS's) in their non-superconducting phases. This question is still very controversial, where some experiments show the existence of the so-called pseudogap non-Fermi-liquid (n-FL) phase (for reviews, see [1, 2]), whereas some others demonstrate the FL quantum oscillations of resistivity [3].

In [4, 5], we suggested a new original method to investigate the FS's in the Q2D conductors in parallel magnetic fields. In the framework of the Boltzmann kinetic equation in the so-called τ -approximation [6, 7], it was shown that in a clean limit perpendicular resistivity did not depend on impurities concentration and was a linear function of the parallel magnetic field,

$$\rho_{zz} \sim C_1 |H|, \quad (1)$$

in a broad region of the fields. This theoretical result was confirmed later in some publications (see, for example, [8]) and was experimentally observed [4, 8, 9]. The important point is that coefficient C_1 depends on some characteristics of a 2D cross-section of the Q2D electron FS, which can be measured in in-plane rotated magnetic fields. Nevertheless, the suggested method has not received still a broad application mainly due to the fact that a validity of the Boltzmann kinetic equation in metallic phases of organic and high- T_c superconductors, in particular in the τ -approximation, is not generally justified.

The goal of our paper is a two-fold. First, we show that Eq. (1) has to be valid for perpendicular resistivity of a clean Q2D conductors also in a quantum case. We demonstrate that it survives even in the quantum picture, where electrons in a strong parallel magnetic field tunnel from one conducting layer to another. This

indicates that the universal resistivity is a very general phenomenon. The second our goal is to suggest possible observations of the above discussed phenomenon as the good test of the existence of the 2D FS's, which is a central question for the majority of organic, high- T_c , and some other layered superconductors in a metallic phase.

Below, we consider a layered superconductor in the so-called tight-binding model [6] with the following Q2D electron spectrum, which is an anisotropic one within the conducting plane:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(p_x, p_y) - 2t_{\perp} \cos(p_z c^*), \quad t_{\perp} \ll \epsilon_F, \quad (2)$$

[Here, $\epsilon(p_x, p_y) = \epsilon_F$, t_{\perp} is the integral of the overlapping of electron wave functions in a perpendicular to the conducting planes direction; ϵ_F is the Fermi energy; $\hbar \equiv 1$.] As to the parallel magnetic field, it is assumed to be inclined by angle β with respect to \mathbf{x} axis, whereas alternative current (a.c.) electric field with small frequency is applied perpendicular to the conducting layer,

$$\mathbf{H} = (\cos \beta, \sin \beta, 0)H, \quad \mathbf{A} = (-\sin \beta, \cos \beta, 0)Hz, \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(t) = [0, 0, \exp(i\omega t - \nu t)]E_0, \quad \nu \rightarrow +0 \quad (4)$$

(see Fig. 1).

Let us rewrite Hamiltonian (2) in the absence of the fields in the following form:

$$\hat{H} = \epsilon \left(-i \frac{\partial}{\partial x}, -i \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{1}{2m} \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} U(z - c^* n), \quad (5)$$

which can be used before the tight binding procedure, performed in Eq. (2) for electron motion along \mathbf{z} axis; m is free electron mass, $U(z - c^* n)$ is potential energy from atomic plane, located at the position $z_n = c^* n$ along \mathbf{z} axis. Let us introduce the magnetic field (3) into the

¹⁾e-mail: lebed@arizona.edu

Hamiltonian (5) by using the so-called Peierls substitution method [6, 7]:

$$-i\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x, \quad -i\frac{\partial}{\partial y} \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y. \quad (6)$$

As a result, we obtain:

$$\hat{H} = \epsilon \left(-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{eHz \sin \beta}{c}, -i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{eHz \cos \beta}{c} \right) + \frac{1}{2m} \left(-i\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} U(z - c^*n). \quad (7)$$

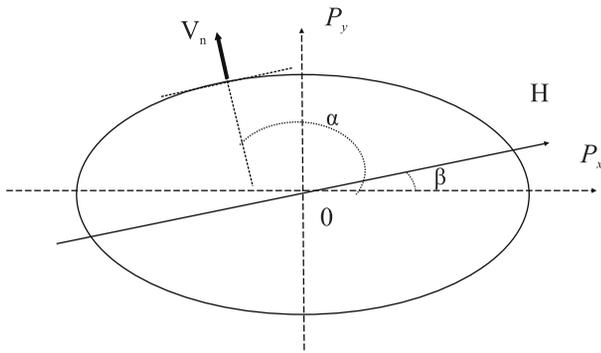


Fig. 1. 2D cross-section of the electron Q2D FS (2) is shown, where the magnetic field (3) is applied at the polar angle β counted from \mathbf{x} axis. The position of electron on the 2D cross-section is characterized by the polar angle α

Quantum Hamiltonian (7) is considered by us in [10], where it is shown that the quantum Kubo formula allows us to write the low frequency conductivity in the form

$$\sigma_{zz}(\omega \rightarrow 0) = \frac{2e^2 t_{\perp}^2 c^*}{\pi} \oint \frac{dl}{|\mathbf{v}_n(l)|} \delta[\omega_c(\alpha, \beta)], \quad (8)$$

where

$$\omega_c(\alpha, \beta) = \left(\frac{e}{c} \right) |\mathbf{v}_n(\alpha)| H c^* \sin(\alpha - \beta), \quad (9)$$

with $\mathbf{v}_n(\alpha)$ being velocity component perpendicular to the 2D FS (see Fig. 1). In the case, where $R(\beta) \neq 0$, it is possible to show that Eq. (8) gives the following result:

$$\sigma_{zz}(\beta) = \frac{2et_{\perp}^2 cR(\beta)}{\pi v_n^2(\beta) |H|} \sim \frac{R(\beta)}{v_n^2(\beta)} \left(\frac{1}{|H|} \right), \quad (10)$$

where $R(\beta)$ – radius of a curvature of the 2D cross-section of the Q2D FS (2).

Note that in the Letter we have used the Landau FL theory [6] and quantum mechanical description for electron motion in a Q2D conductor as well as quantum

mechanical description of conductivity – the Kubo formula. So, if the FL theory is valid in some Q2D conductor, experimentalists can conduct experiments in parallel magnetic fields and can discover unusual linear magnetoresistance (1) and (10). Then, they can rotate the field and extract angular dependence of the important 2D FS parameter $\frac{v_n^2(\beta)}{R(\beta)}$ (see Fig. 1) which allows to make some conclusions about the shape of the 2D FS.

On the hand, Eq. (10) can be used for testing of a validity of the Landau FL description and of the existence of the Q2D(2D) FS in a given layered conductor. To get metallic phase in high- T_c superconductors, we typically need pulsed ultrahigh magnetic fields (see, for example, [11]), whereas in organic superconductors [9], UTe_2 [12–14], NbS_2 , and NnSe_2 [15] steady high parallel magnetic fields can be experimentally applied.

The author is thankful to N. N. Bagmet (Lebed) for useful discussions.

This is an excerpt of the article “A method to reveal and investigate almost 2D Fermi surfaces in layered conductors: Universal resistivity in a parallel magnetic field”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601707

1. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
2. S. I. Vedenev, *Phys.-Uspekhi* **64**, 890 (2021).
3. N. Barišić, S. Badoux, M. Chan, C. Dorow, W. Tabis, B. Vignolle, G. Yu, J. B'ear, Xudong Zhao, C. Proust, and M. Greven, *Nature Phys.* **9**, 761 (2013).
4. A. G. Lebed and N. N. Bagmet, *Phys. Rev. B* **55**, R8654 (1997).
5. A. G. Lebed and N. N. Bagmet, *Synth. Met.* **85**, 1493 (1997).
6. A. A. Abrikosov, *Fundamentals of Theory of Metals*, Elsevier Science, Amsterdam (1988).
7. I. M. Lifshits, M. Ya. Azbel and M. I. Kaganov, *Electron Theory of Metals*, Consultants Bureau, N.Y. (1973).
8. A. J. Schofield and J. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **62**, 10779 (2000).
9. *The Physics of Organic Superconductors and Conductors*, ed. by A. G. Lebed, Springer-Verlag, Berlin (2008).
10. A. G. Lebed, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 247003 (2005).
11. A. S. Dzurak, B. E. Kane, R. G. Clark et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **57**, R14084 (1998).
12. S. Ran, C. Eckberg, Q. P. Ding, Y. Furukawa, T. Metz, S. R. Saha, I.-L. Liu, V. Zic, H. Kim, J. Paglione, and N. P. Butch, *Science* **365**, 684 (2019).
13. A. G. Lebed, *Mod. Phys. Lett. B* **34**, 2030007 (2020).
14. V. P. Mineev, *JETP Lett.* **111**, 715 (2020).
15. Ch.-w. Cho, Ch.Y. Ng, Ch.H. Wong, M. Abdel-Hafez, A. N. Vasiliev, D. A. Chareev, A. G. Lebed, and R. Lortz, *New J. Phys.* **24**, 083001 (2022).

Нетепловая фотоиндуцированная редукция коэрцитивного поля в тонких эпитаксиальных пленках $L1_0$ -фазы FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16}¹⁾

А. В. Петров⁺, С. И. Никитин⁺, Л. Р. Тагиров^{+*}, А. С. Камзин[×], Р. В. Юсупов⁺²⁾

⁺Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

^{*}Казанский физико-технический институт, Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр Российской академии наук”, 420029 Казань, Россия

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

Поступила в редакцию 2 мая 2023 г.

После переработки 14 июня 2023 г.

Принята к публикации 14 июня 2023 г.

Выполнены исследования времяразрешенного магнитооптического эффекта Керра в тонких эпитаксиальных пленках соединения FePt и твердого раствора FePt_{0.84}Rh_{0.16} с перпендикулярной магнитной анизотропией на подложках MgO (001). Изучена эволюция петель гистерезиса на малых (100 фс – 1 нс) и больших (1–20 мс) временных масштабах после возбуждения фемтосекундным световым импульсом. Обнаружен эффект долгоживущей нетепловой редукции коэрцитивного поля. Величина коэрцитивного поля восстанавливается на временном масштабе единиц миллисекунд. Предложена гипотеза, связывающая наблюдаемое явление с возбуждением высокооборотных акустических резонансов в системе подложка/пленка и сильным магнитоупругим взаимодействием в пленках FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16}.

DOI: 10.31857/S1234567823140070, EDN: gzkdef

Стремительное развитие информационных технологий неразрывно связано с увеличением объемов данных, основными носителями которых на сегодняшний день остаются жесткие диски на тонких магнитных пленках. Непосредственное увеличение емкости жестких дисков достигается путем повышения плотности записи или, эквивалентно, уменьшением размеров магнитных зерен, отвечающих за бит информации. Уменьшение объема частиц ограничено возникновением суперпарамагнитного эффекта, когда направление намагниченности зерна начинает испытывать флуктуации. Критерий, удовлетворение которому обеспечивает требуемую в устройствах хранения данных стабильность, определяется как $K_u V / k_B T \geq 60$, где K_u – константа одноосной анизотропии, V – объем зерна, k_B – постоянная Больцмана и T – температура [1]. Уменьшение размеров магнитных зерен оказывается возможным при использовании материалов с большой магнитокристаллической анизотропией. В этом плане привлекают внимание ферромагнитные тонкие пленки упорядоченной $L1_0$ -фазы соединения FePt. Константа магнитокристаллической анизотропии в эпитаксиальных пленках $L1_0$ -FePt на подложке MgO (001) имеет величины, достигающие 10^7 эрг/см³ [2, 3]. Кро-

ме того, эти пленки являются легкоосными системами с равновесным направлением намагниченности, перпендикулярным плоскости пленки. Большое значение константы анизотропии, с одной стороны, позволяет уменьшить размер магнитных зерен, оставаясь вдали от суперпарамагнитного предела. С другой стороны, повышенное значение константы анизотропии требует не всегда реалистичных значений индукции магнитного поля для переключения намагниченности. Для уменьшения поля переключения магнитожестких сред была предложена технология термоассистированной магнитной записи (*heat-assisted magnetic recording*, HAMR) с нагревом магнитного зерна, например, светом, непосредственно перед приложением магнитного поля записи бита [4].

В методе HAMR важным параметром ферромагнитного материала выступает температура Кюри, значение которой влияет на время и энергию, затрачиваемые на перемагничивание частиц. Введением различных примесей в состав соединения FePt можно управлять температурой Кюри получившегося материала без существенного изменения коэффициента магнитокристаллической анизотропии. Известны примеры такой настройки путем замещения железа никелем [5], марганцем [6] или медью [7]. Вызывает интерес и замещение платины родием, которое также приводит к уменьшению температуры Кюри [8].

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

²⁾e-mail: Roman.Yusupov@kpfu.ru

В настоящей работе представлены результаты исследования тонких эпитаксиальных пленок составов FePt и FeP_{0.84}Rh_{0.16} с перпендикулярной магнитной анизотропией, свидетельствующие о том, что интенсивное фотовозбуждение этих материалов фемтосекундными световыми импульсами приводит к долгоживущей редукции коэрцитивного поля нетепловой природы, восстановление которого происходит на временном масштабе единиц миллисекунд.

Объектами исследования служили сплошные тонкие эпитаксиальные пленки составов FePt и FeP_{0.84}Rh_{0.16} на подложках MgO (001), описание метода синтеза и первичная характеристика которых представлены в разделе А дополнительных материалов. Там же, в разделе В, описаны использованные методика и техника измерений. На рисунке 1 представлены статические кривые перемагничивания пленок FePt и FeP_{0.84}Rh_{0.16}, измеренные методами вибрационной магнитометрии и вращения плоскости поляризации в магнитооптическом эффекте Керра (МОЭК) в полярной геометрии.

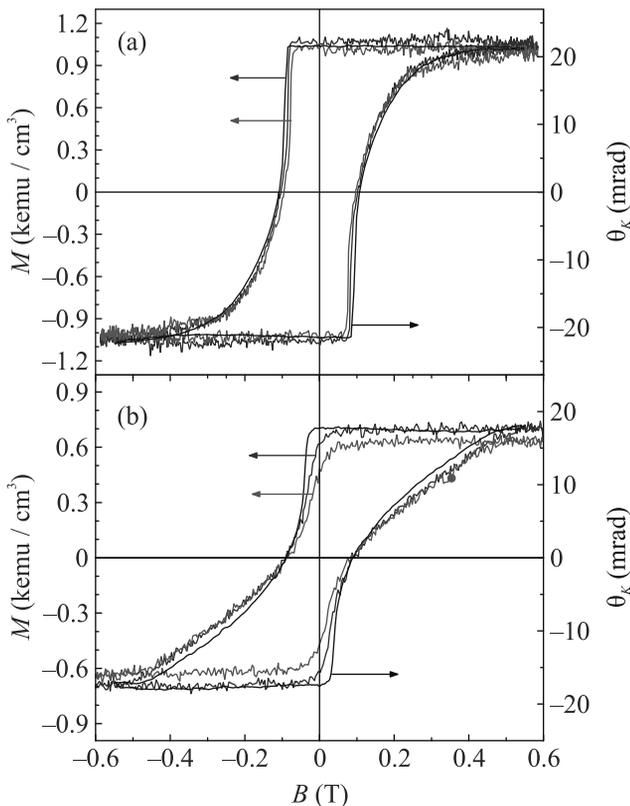


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости намагниченности (левые оси), а также угла вращения Керра (правые оси) образцов FePt (a) и FeP_{0.84}Rh_{0.16} (b) от внешнего приложенного поля. Намагниченность измерена при температурах 300 К (синие линии) и 350 К (красные линии)

Намагниченность достигает насыщения в полях с индукцией ~ 0.5 Тл в обоих образцах. При $T = 300$ К величина намагниченности насыщения 1050 э.м.е./см³ пленки FePt соответствует углу поворота Керра 22 мрад; для пленки FePt_{0.84}Rh_{0.16} аналогичный показатель 700 э.м.е./см³ соответствует углу 18 мрад. Повышение температуры образцов FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16} до 350 К приводит к понижению намагниченности насыщения примерно на ~ 6 и 10 % соответственно. Различие двух материалов в отклике на нагрев объясняется заметно более низкой температурой Кюри T_C для состава, содержащего родий ($T_C = 590$ К для FePt_{0.84}Rh_{0.16} против $T_C = 740$ К для FePt). Что важно, при повышении температуры коэрцитивное поле практически не изменяется и составляет ~ 100 мТл для пленки FePt и 89 мТл для FePt_{0.84}Rh_{0.16}.

Динамика изменения угла поворота Керра после сверхкороткого импульса накачки (длина волны 400 нм, длительность импульса 50 фс) в поле с индукцией $B = 0.55$ Тл для набора значений плотности энергии возбуждения представлены на рис. 2. Зондирование при этом осуществлялось на длине волны 800 нм, длительность импульса ~ 40 фс. Видно, что характер зависимости меняется с увеличением уровня накачки: если при низких значениях плотности энергии проявлялась быстрая, на масштабе единиц пикосекунд, компонента релаксации, то при высоких значениях такая компонента перестает наблюдаться.

Далее представлены результаты исследований времяразрешенного магнитооптического эффекта Керра. На рисунке 3 показана временная эволюция кривой гистерезиса обоих образцов. Плотность энергии накачки составляла $\Phi = 6.4$ мДж/см². Первоначально измерения были проведены при частоте следования импульсов лазера 1 кГц (рис. 3а и б). Максимальное подавление намагниченности насыщения наблюдается в диапазоне задержек $\Delta t = 2 \div 50$ пс и достигает 72 % для пленки FePt и 88 % для FePt_{0.84}Rh_{0.16}. При больших величинах задержки происходит восстановление намагниченности насыщения, которая практически возвращается к исходной величине спустя 1.7 нс. При наличии долговременной динамики малая отрицательная задержка $\Delta t = -10$ пс может рассматриваться как положительная большая, равная периоду следования импульсов лазера T_l , относительно предыдущего импульса накачки ($\Delta t = T_l$). Как видно из рис. 3а и б, амплитуда кривой гистерезиса при такой задержке полностью восстанавливается.

Наиболее яркой особенностью петель гистерезиса обоих образцов в условиях импульсного фотовозбуж-

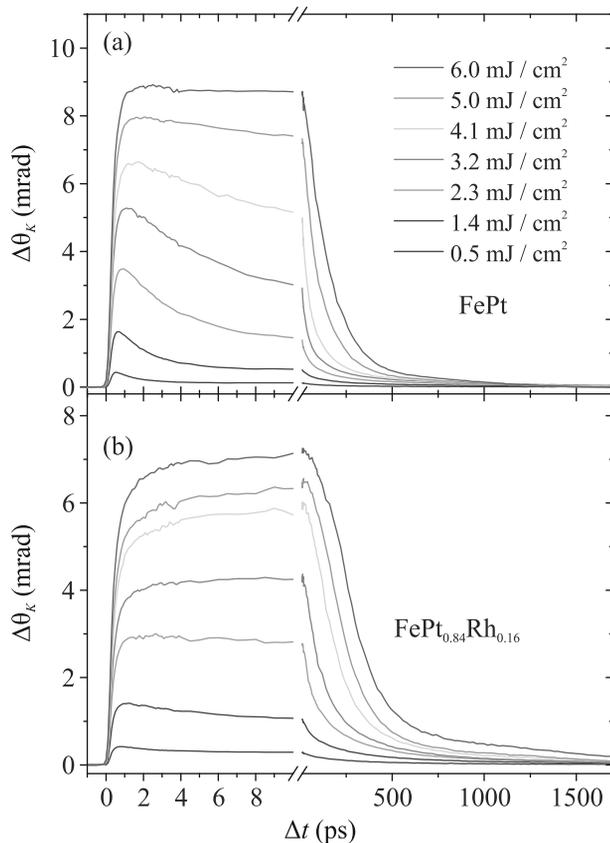


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости изменения угла поворота Керра от задержки между импульсами накачки и зондирования при разных плотностях энергии накачки для тонких пленок FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16}; магнитное поле с индукцией 0.55 Тл приложено вдоль нормали к пленкам

дения является устойчивое во времени подавление коэрцитивного поля, составляющее $\sim 70\%$ и $\sim 83\%$ для FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16} соответственно. Уменьшение коэрцитивности имеет место даже спустя 1 мс после импульса накачки. Для экспериментальной оценки того, как долго сохраняется эффект подавления коэрцитивности, аналогичные измерения были проведены при частоте следования импульсов 100 Гц. Результаты этих измерений представлены на рис. 3с и d. Здесь подавление коэрцитивности так же устойчиво на всем рассматриваемом диапазоне времен задержки, но является менее выраженным. Для пленки FePt коэрцитивное поле понижено незначительно, максимум на $\sim 18\%$, для FePt_{0.84}Rh_{0.16} – на $\sim 60\%$. Дополнительное отличие этих наблюдений от экспериментов при частоте лазера 1 кГц заключается в более слабом фотоиндуцированном уменьшении намагниченности при всех задержках времени и той же плотности энергии накачки. Максимальное измене-

ние намагниченности насыщения у образца FePt составляет 45 %, у FePt_{0.84}Rh_{0.16} – на 78%.

Более детально зависимости коэрцитивного поля образцов от периода следования импульсов лазера T_l и плотности энергии накачки показаны на рис. 4. В этих экспериментах петля гистерезиса измерялась по углу поворота плоскости поляризации при задержке импульса зондирования $\Delta t = -10$ пс (эквивалентно $\Delta t = T_l$, см. выше). Соответственно, рис. 4а иллюстрирует долговременную, до 50 мс, динамику восстановления величины коэрцитивного поля (при этом плотность энергии накачки фиксировалась на 5.5 мДж/см²). Сплошными линиями на рис. 4а показаны результаты аппроксимации полученных данных функцией $y = A - B \exp(-T_l/\tau)$, где τ – временная константа процесса восстановления коэрцитивности. Значения константы τ для тонких пленок FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16} составили 1.86 ± 0.15 мс и 2.8 ± 0.3 мс соответственно.

Рисунок 3b иллюстрирует зависимость коэрцитивного поля исследованных тонких пленок от плотности энергии накачки при фиксированной частоте 1 кГц. Величина коэрцитивности обоих образцов уменьшается с увеличением плотности энергии накачки, однако характер зависимостей несколько отличается. В пленке FePt с увеличением плотности накачки коэрцитивность уменьшается постепенно во всем диапазоне, достигая минимальной величины в 24 мТл при накачке 6.4 мДж/см². В пленке FePt_{0.84}Rh_{0.16} можно выделить диапазоны слабой зависимости подавления коэрцитивности от плотности энергии накачки $\Phi = 0 \div 3.2$ мДж/см² и более 5 мДж/см², и область сильной зависимости $\Phi = 3.2 \div 4.1$ мДж/см².

Таким образом, в экспериментах по сверхбыстрой фотоиндуцированной динамике намагниченности сплошных эпитаксиальных ферромагнитных тонких пленок со структурой тетрагональной L1₀-фазы и перпендикулярной магнитной анизотропией проявляется сильная зависимость коэрцитивного поля от периода следования импульсов накачки. Что интересно, состояние с редуцированной коэрцитивностью сохраняется достаточно долго, миллисекунды. При этом величина намагниченности после импульса накачки восстанавливается до исходной уже спустя 2 нс, после чего практически не меняется. В то же время, статический нагрев пленок от 300 до 350 К (рис. 1) ведет в первую очередь к уменьшению намагниченности при сохранении коэрцитивного поля (более ярко это проявляется для состава FePt_{0.84}Rh_{0.16}). Такое сопоставление говорит о нетепловой природе фотоиндуцированной редукции

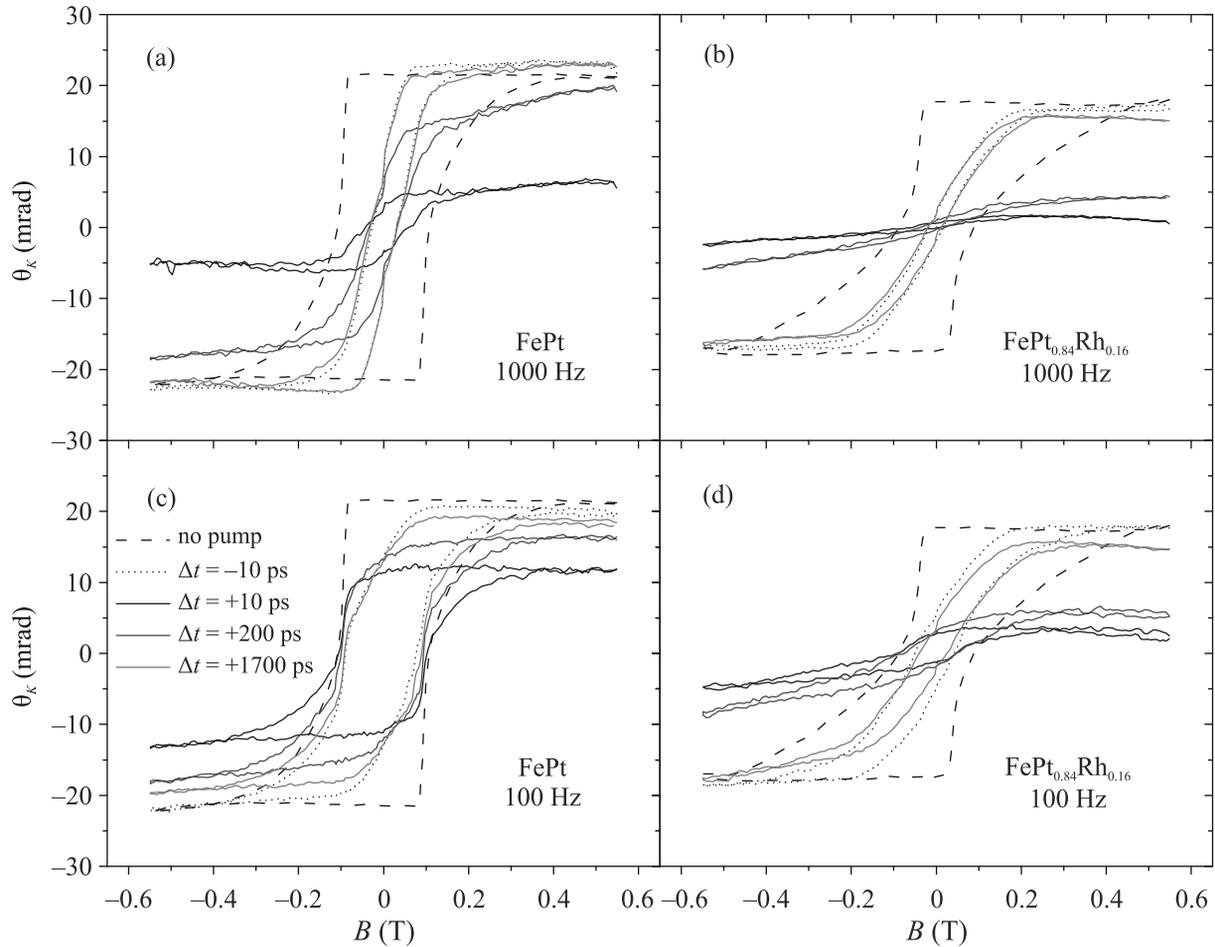


Рис. 3. (Цветной онлайн) Кривые перемагничивания тонких эпитаксиальных пленок FePt (a), (c) и FePt_{0.84}Rh_{0.16} (b), (d) по углу поворота Керра при $T = 300$ К. Пунктирными линиями показаны равновесные кривые. Временноразрешенные данные представлены для частот следования импульсов накачки 1 кГц (a), (b) и 100 Гц (c), (d). Синими линиями показаны кривые гистерезиса для задержки относительно импульса накачки $\Delta t = +10$ пс, голубыми – для $\Delta t = +200$ пс, оранжевыми – для $\Delta t = +1700$ пс. Штриховыми (точечными) линиями показаны данные для $\Delta t = -10$ пс, что соответствует задержке относительно предыдущего импульса в 1 мс (a), (b) или 10 мс (c), (d). Плотность энергии накачки – 6.4 мДж/см^2

коэрцитивного поля. Впрочем, при невысокой, 1 кГц и менее, частоте следования импульсов накачки эффект накопления тепла, как правило, пренебрежимо мал, а исходная равновесная температура восстанавливается за наносекунды.

Обращает на себя внимание большое время восстановления коэрцитивного поля. Можно было бы предположить, что наблюдаемая редукция связана с макроскопическими явлениями, например, фотоиндуцированным структурным фазовым переходом. В самом деле, повышение симметрии структуры до кубической могло бы привести к существенному уменьшению коэрцитивности. Однако постепенное, без скачков, изменение коэрцитивного поля при уменьшении периода следования импульсов

(рис. 4а) показывает, что наши наблюдения, скорее всего, с фотоиндуцированным фазовым переходом не связаны.

Кроме того, если бы в результате разогрева пленки происходил структурный переход из тетрагональной $L1_0$ -фазы в высокотемпературную кубическую $A1$ фазу (см., например, [9]), то в силу чрезвычайной близости энергий упорядоченной $L1_0$ -фазы и неупорядоченной кубической фазы того же состава, происходило бы структурное разупорядочение низкотемпературной фазы при частоте следования лазерных импульсов 1 кГц. Это было бы видно по уменьшению равновесного коэрцитивного поля, которое в разы меньше в неупорядоченной фазе по сравнению с тетрагональной $L1_0$ -фазой (см., например, [10]). В

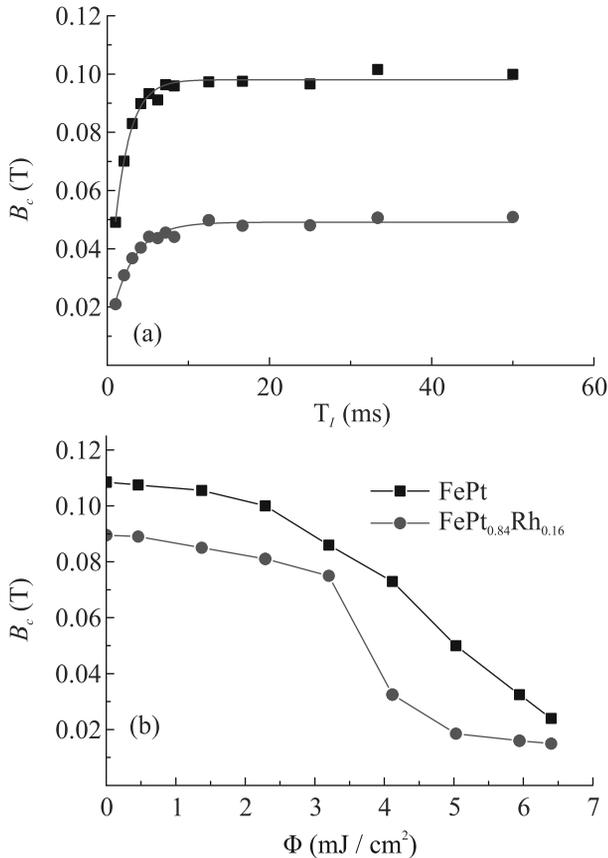


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости коэрцитивного поля пленок FePt (квадраты) и FePt_{0.84}Rh_{0.16} (круги) от периода следования (а) и от плотности энергии накачки (б), измеренные при отрицательной задержке -10 пс (см. текст). Плотность энергии в эксперименте панели (а) $\Phi = 5.5$ мДж/см²; частота следования импульсов накачки в эксперименте панели (б) $f = 1000$ Гц. Линиями на панели (а) показаны результаты аппроксимации функцией $y = A - B \exp(-T_l/\tau)$

эксперименте равновесное коэрцитивное поле не зависит от длительности проведения эксперимента.

Наконец, еще одним указанием на нетепловой механизм редукции коэрцитивного поля является динамика намагниченности: последняя восстанавливается спустя ~ 1.7 нс после импульса накачки и далее остается неизменной. В то же время, коэрцитивное поле остается редуцированным до ~ 2 мс, т.е. на временах на шесть порядков длиннее времени восстановления намагниченности.

Процессы перемангничивания сплошных тонких пленок с перпендикулярной магнитной анизотропией в поле, приложенном вдоль легкой оси (рис. 1 и 3), включают две необходимых стадии, а именно, зарождение доменов с противоположным исходному направлению намагниченности и их рост за счет дви-

жения доменных стенок. Первая из этих стадий проявляется в изломе в петле гистерезиса с уменьшением абсолютной величины намагниченности относительно насыщенного состояния. “Трение”, возникающее при росте доменов за счет движения доменных стенок, связано с их пиннингом на дефектах в пленке. Энергетический масштаб, характеризующий пиннинг, определяет при заданной температуре величину коэрцитивного поля. Экспериментальные результаты, представленные на рис. 3, однозначно показывают, что обе стадии процесса перемангничивания как в пленке FePt, так и FePt_{0.84}Rh_{0.16} происходят в условиях импульсного фотовозбуждения при значительно меньших магнитных полях, что в целом приводит к существенному магнитному смягчению. Более того, поскольку нагрева в течение подавляющей доли времени между импульсами накачки нет, наблюдаемое магнитное смягчение имеет нетепловую природу. С чем же это может быть связано, если не с нагревом?

Оба процесса, и зародышеобразование, и движение доменных стенок, имеют активационную природу. Соответственно, в отсутствие нагрева смягчение магнитных характеристик требует либо уменьшения соответствующих энергий активации, либо нетепловой “подкачки” энергии в магнитную подсистему. Сравнительно недавно в работе [11] сообщалось о наблюдении редукции коэрцитивного поля в два раза в эпитаксиальной пленке магнитного полупроводника Ga_{1-x}Mn_xAs_{0.96}P_{0.04} с перпендикулярной анизотропией при воздействии на нее ультразвуковыми импульсами, возбуждающими поверхностные акустические волны (ПАВ, или SAW – *Surface Acoustic Waves*). Частота ультразвука была 549 МГц, длительность импульса 600 нс, период следования – 20 мс. Авторы [11] связывали наблюдаемый эффект с периодическим снижением энергии зарождения доменов, зависящей от деформации, под действием ПАВ. Близкие по природе явления, связанные с лазерно-индуцированной модификацией магнитной анизотропии, обсуждаются в статье [12]. Обзор по современному состоянию сверхбыстрой магнитоакустики представлен в работе [13].

Сходную природу может иметь и описываемое нами явление. Так, во-первых, известно, что поглощение сверхкоротких световых импульсов приводит к генерации гиперзвуковой волны с широким (до сотен гигагерц) частотным спектром [14, 15]. Во-вторых, характерной чертой соединения FePt является рекордная величина магнитоупругой связи; магнитоупругость в нем даже больше, чем в классическом примере никеля [16–18]. Таким образом, акустиче-

ская волна, индуцированная фемтосекундным световым импульсом, может повышать энергию магнитной подсистемы. В-третьих, в телах правильной формы, к которым можно отнести плоскопараллельную монокристаллическую подложку MgO, резонансные акустические моды могут иметь высокую добротность [19] и, соответственно, служить слабодиссипативным энергетическим резервуаром с эффективным каналом передачи энергии в магнитную пленку. Эпитаксиальный характер исследуемых пленок, в свою очередь, обеспечивает передачу деформации от подложки к пленке, что, благодаря сильной магнитоупругой связи, может увеличить энергию магнитной подсистемы и облегчить как зарождение доменов, так и нетепловой депиннинг доменных стенок. А высокая добротность акустических резонансов ведет к длительной редукции коэрцитивного поля. Различие во временах восстановления коэрцитивного поля для двух составов пленок, на наш взгляд, может быть связано с разницей в величинах констант магнитоупругого взаимодействия. Родий, как заметно более легкий элемент, характеризуется более слабым спин-орбитальным взаимодействием, и замещение платины родием должно привести к уменьшению магнитоупругой константы.

Близкое по проявлению в эксперименте уменьшение поля переключения магнитного джозефсоновского контакта в присутствии микроволновой подкачки наблюдалось в работе [20]. Результат интерпретировался как возбуждение микроволновым излучением флуктуаций локальных магнитных моментов кластеров PdFe, что сокращает коэрцитивное поле и облегчает процесс перемагничивания.

Таким образом, в результате проведенных исследований тонких эпитаксиальных пленок FePt и FePt_{0.84}Rh_{0.16} на монокристаллических подложках MgO нами обнаружен эффект фотоиндуцированного магнитного смягчения нетепловой природы, приводящий к долгоживущей редукции коэрцитивного поля. Предложена гипотеза, связывающая природу эффекта с возбуждением фемтосекундными лазерными импульсами акустических резонансов в системе подложка-пленка. Эффект, на наш взгляд, может лежать в основе технологии, альтернативной термоассистированной магнитной записи, используемой в магнитных жестких дисках на базе гранулярных сред FePt.

Работа была поддержана программой стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

Вклад Л. Р. Тагирова в работу был поддержан темой госзадания ФИЦ КазНЦ РАН # 122011800133-2.

1. D. Weller and A. Moser, *IEEE Trans. Magn.* **35**, 4423 (1999).
2. K. Inomata, T. Sawa, and S. Hashimoto, *J. Appl. Phys.* **64**, 2537 (1988).
3. N. Miyata, H. Asami, T. Mizushima, and K. Sato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 1817 (1990).
4. M. H. Kryder, E. C. Gage, T. W. McDaniel, W. A. Challener, R. E. Rottmayer, G. Ju, Y.-T. Hsia, and M. Fatih Erden, *IEEE Proc.* **96**, 1810 (2008).
5. J. U. Thiele, K. R. Coffey, M. F. Toney, J. A. Hedstrom, and A. J. Kellock, *J. Appl. Phys.* **91**, 6595 (2002).
6. D. B. Xu, J. S. Chen, T. J. Zhou, and G. M. Chow, *J. Appl. Phys.* **109**, 07B747 (2011).
7. D. A. Gilbert, L. W. Wang, T. J. Klemmer, J. U. Thiele, C. H. Lai, and K. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 132406 (2013).
8. T. Hasegawa, J. Miyahara, T. Narisawa, S. Ishio, H. Yamane, Y. Kondo, J. Ariake, S. Mitani, Y. Sakaruba, and K. Takanashi, *J. Appl. Phys.* **106**, 103928 (2009).
9. O. Gutfleisich, J. Lyubina, K.-H. Muller, and L. Schulh, *Adv. Eng. Mater.* **7**, 208 (2005).
10. Y. B. Li, Y. F. Lou, L. R. Zhang, B. Ma, J. M. Bai, and F. L. Wei, *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 3789 (2010).
11. L. Thevenard, I. S. Camara, J.-Y. Prieur, P. Rovillain, A. Lemaître, C. Gourdon, and J.-Y. Duquesne, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **93**, 140405 (2016).
12. А. М. Калашникова, Н. Е. Хохлов, Л. А. Шелухин, А. В. Щербаков, *ЖТФ* **91**, 1848 (2021).
13. В. С. Власов, А. В. Голов, Л. Н. Котов, В. И. Щеглов, А. М. Ломоносов, В. В. Темнов, *Акустический журнал* **68**, 22 (2022).
14. С. А. Ахманов, В. Э. Гусев, *УФН* **162**, 3 (1992).
15. C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, and J. Tauc, *Phys. Rev. B* **34**, 4129 (1986).
16. Н. С. Акулов, З. И. Ализаде, К. П. Белов, *ДАН СССР* **65**, 815 (1949).
17. W. Li, W. Zhou, P. Lenox, T. Seki, K. Takanashi, A. Jander, and P. Dhagat, *IEEE Trans. Magn.* **51**, 2504904 (2015).
18. F. E. Spada, F. T. Parker, C. L. Platt, and J. K. Howard, *J. Appl. Phys.* **94**, 5123 (2003).
19. A. Migliori, J. L. Sarrao, W. M. Visscher, T. M. Bell, M. Lei, Z. Fisk, and R. G. Leisure, *Phys. B: Cond. Matt.* **183**, 1 (1993).
20. R. Caruso, D. Massarotti, V. V. Bolginov, A. Ben Hamida, L. N. Karelina, A. Miano, I. V. Vernik, F. Tafuri, V. V. Ryazanov, O. A. Mukhanov, and G. P. Pepe, *J. Appl. Phys.* **123**, 133901 (2018).

Эффекты памяти в магнетосопротивлении двухкомпонентных электронных систем

К. С. Денисов, К. А. Барышников, П. С. Алексеев¹⁾

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

Поступила в редакцию 4 апреля 2023 г.

После переработки 13 июня 2023 г.

Принята к публикации 14 июня 2023 г.

Развита теория магнетотранспорта в двухкомпонентной электронной системе с редкими макроскопическими дефектами. В такой системе определяющую роль играют классические эффекты памяти при рассеянии электронов на дефектах и медленные переходы электронов между компонентами жидкости за счет межэлектронного рассеяния. Показано, что режим течения зависит от соотношения между шириной образца и характерной внутренней длиной, определяемой темпом переходов электронов между компонентами. В образцах шире внутренней длины формируется течение единой двухкомпонентной жидкости в объеме образца, которое описывается объемными формулами Друде с учетом эффектов памяти. В этом случае магнетосопротивление является знакопеременным: положительным в малых магнитных полях и отрицательным в больших полях. В узких образцах, с ширинами меньше характерной длины, переходы с изменением типа электронов не успевают сформировать единую жидкость. В результате течения каждой из компонент являются независимыми и описываются собственными проводимостями с учетом эффектов памяти, при этом магнетосопротивление оказывается строго отрицательным.

DOI: 10.31857/S1234567823140082, EDN: gzkxjr

1. Введение. В проводниках с локализованными дефектами в магнитных полях возможны эффекты памяти (ЭП), связанные с корреляциями в расположении дефектов и траекторий электронов. Благодаря этим корреляциям динамика электронов приобретает немарковский характер. ЭП в достаточно большом магнитном поле обусловлены появлением траекторий электронов, не сталкивающихся с дефектами или сталкивающихся с одним и тем же дефектом несколько раз подряд [1–4], а в малом магнитном поле – возвращающихся к одному и тому же дефекту после рассеяния на соседнем [5, 6]. Наличие в образце плавного беспорядка, дополнительного к локализованным дефектам, существенно модифицирует и усложняет характер ЭП в магнитном поле [7–9]. Наблюдаемым проявлением всех ЭП является нетривиальное сильное и слабое отрицательное магнетосопротивление.

При изучении ЭП при рассеянии на локализованных дефектах обычно предполагается, что интенсивность межэлектронных столкновений является предельно малой, в частности, соответствующая длина рассеяния l_{ee} считается малой по сравнению с характерным расстоянием между дефектами $d \gg R$ и длиной свободного пробега относительно рассея-

ния на них $l \sim d^2/R$ (R – размер дефекта). С ростом магнитного поля и приближением циклотронного радиуса R_c к величине d даже редкие межэлектронные столкновения становятся существенными и начинает формироваться гидродинамический режим. Между дефектами формируются пространственно неоднородные вязкие течения электронной жидкости. Экспериментально переход между омическим (при $R_c \gtrsim d$) и гидродинамическим (при $R_c \ll d$) режимами, по-видимому, наблюдался в образцах квантовых ям GaAs с макродефектами в работах [10–15] (см. обсуждения в статье [16]). В работе [17] такой переход был изучен в образцах GaAs ям с искусственно сделанными дефектами контролируемой плотности.

Аналогичный переход в гидродинамический режим транспорта при увеличении магнитного поля возможен также в бездефектных полосках, где рассеяния на шероховатостях краев образца приводят к релаксации импульса электронов. Последний переход наблюдался в работах [18–20] для чистых полосок графена и квантовых ям GaAs. При редких межэлектронных столкновениях, $l_{ee} \gg W$, переход происходил резко: при критическом магнитном поле $B = B_c$, отвечающем равенству $W = 2R_c$, где W – ширина полоски. Такой переход теоретически описан численными теориями [21, 22] и аналитической тео-

¹⁾e-mail: pavel.alekseev@mail.ioffe.ru

рией [23–26]. Межэлектронные столкновения оказывались критически важны в полях $B \approx B_c$ в окрестности перехода. В магнитных полях $B < B_c$ они приводили к “пред-гидродинамическим” поправкам к сопротивлению и эффекту Холла. Эти поправки являются предвестниками формирования вязкого течения и малыми по параметру W/l_{ee} [25, 26].

В работах [27–29] изучен магнетотранспорт в двухкомпонентных электрон-дырочных системах с беспорядком, не приводящим к ЭП. Было показано, что за счет появления в магнитном поле потоков частиц к краям образца и рекомбинации частиц у краев могут формироваться пространственно неоднородные течения даже без учета сдвиговой вязкости. В этих течениях возникают прикраевые слои с повышенной плотностью тока, что может приводить к сильному линейному положительному магнетосопротивлению.

Таким образом, представляет интерес исследовать влияние слабо межэлектронного взаимодействия на омический режим транспорта 2D электронов при сильных ЭП. Представляется особенно интересным изучить случай двухкомпонентной системы из электронов с разными параметрами, в которой редкие межэлектронные столкновения могут приводить к сильным гидродинамическим эффектам за счет переходов электронов между компонентами.

В этой работе развита теория магнетотранспорта в системе слабо взаимодействующих вырожденных 2D электронов двух типов, испытывающих классические ЭП при рассеянии на дисках (см. рис. 1). Следуя работам [1–6], мы предполагаем, что в малых магнитных полях, $R_c \gg l$, все электроны рассеиваются на дефектах случайным образом, а в сильных полях, когда $R_c \lesssim l$, часть электронов сталкивается с дефектами случайным образом, а часть не сталкивается с ними, что определяет ЭП в этой системе. Мы не учитываем “пред-гидродинамические” поправки, малые по параметру $l/l_{ee} \ll 1$. Межэлектронные столкновения, приводящие к переходам электронов из одной компоненты в другую, совместно с ЭП и силами давления за счет неоднородности плотности электронов, вызывают неоднородное распределение потоков частиц по образцу. В достаточно широких образцах формируется течение единой двухкомпонентной системы с сильными ЭП. В узких образцах течения электронов каждой из компонент являются независимыми и проявляют ЭП, характерные для однокомпонентных систем. Это приводит к нетривиальному магнетосопротивлению (МС) и эффекту Холла, наблюдение которых может служить маркером такого режима транспорта.

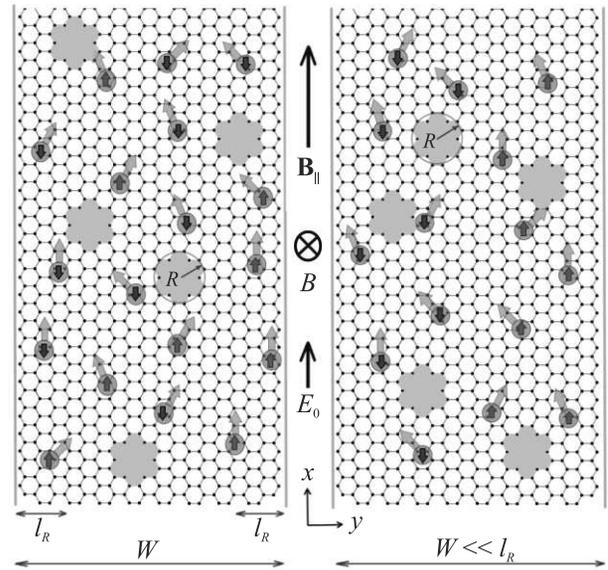


Рис. 1. (Цветной онлайн) Два образца различных ширины W с круглыми макродефектами радиуса R (дисками) во внешних полях $E_0 \mathbf{e}_x$ и $\mathbf{B}_{\text{tot}} = \mathbf{B}_{\parallel} + B \mathbf{e}_z$. Компонента в плоскости B_{\parallel} магнитного поля B вызывает расщепление спектра 2D электронов по спину \uparrow, \downarrow ; перпендикулярная слою компонента B определяет силу Лоренца, действующую на электроны. Две спиновые компоненты электронной жидкости $\alpha = \uparrow, \downarrow$ обозначены красными и синими стрелками. В широком образце, $W \gg l_R$, формируются прикраевые слои ширинами l_R , в которых концентрации компонент δn_{α} и их потоки \mathbf{j}^{α} возмущены (левая панель). В узком образце, $W \ll l_R$, концентрации обеих компонент $\alpha = \uparrow, \downarrow$ неоднородны по всему сечению образца

Изученные системы могут реализоваться, например, в графене и в квантовых ямах с макродефектами, к которым приложено сильное наклонное магнитное поле, приводящее к расщеплению спектра электронов по спину и формированию двух зеемановски расщепленных подзон с различными параметрами (см. эксперименты [11, 15, 17, 30]).

2. Магнетотранспорт в двухкомпонентной системе с учетом эффектов памяти и редких переходов частиц между компонентами. В работах [1–6] был изучен омический магнетотранспорт в однокомпонентных системах вырожденных 2D электронов, обусловленный ЭП при рассеянии электронов на дисках. С ростом магнитного поля появляется некоторая часть электронов, а именно, $P = e^{-2\pi/(\omega_c \tau_q)}$, которые не сталкиваются с дефектами за счет геометрии расположения траекторий (здесь τ_q – уходящее время рассеяния). Движение таких “заикленных” электронов представляет собой ЕН-дрейф, что определяет их вклад только в холловскую компоненту проводимости. Остальные элек-

троны, доля которых равна $1 - P$, сталкиваются либо с разными дефектами случайным образом (“путешествующие” электроны), либо сталкиваются несколько раз подряд с одним и тем же дефектом (электроны на “розеточных траекториях”). Первые определяют диффузию и проводимость, а вторые оказываются локализованными долгое время и участвуют в формировании тока после ухода от дефекта, с которым сталкивались несколько раз. Среднее уходное время, входящее в P , можно оценить, как время релаксации импульса для путешествующих электронов: $\tau_q \sim \tau \sim (Rn_d v_F)^{-1}$.

В работах [2, 3] было показано, что для приближенного описания магнетотранспорта 2D электронов (с относительной точностью до 20%), можно учитывать только путешествующие и зацикленные электроны. Соответствующий тензор проводимости имеет вид

$$\sigma_{xx} = (1 - P) \frac{e^2 n_0 \tau}{m} \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (1)$$

$$\sigma_{xy} = P \frac{e^2 n_0}{m \omega_c} + (1 - P) \frac{e^2 n_0 \tau}{m} \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (2)$$

где $\omega_c = eB/(mc)$ – циклотронная частота. Для длинного образца (холловская геометрия) обращение тензора $\hat{\sigma}$ приводит к тензору сопротивления:

$$\varrho_{xx}/\varrho_0 \approx 1 - P, \quad \varrho_{xy} \approx \varrho_{xy}^0, \quad (3)$$

где $\varrho_0 = m/(e^2 n_0 \tau)$ – друдевское сопротивление в нулевом магнитном поле, $\varrho_{xy}^0 = B/(n_0 e c)$ – стандартное холловское сопротивление. Относительные величины поправок к этим выражениям составляют менее 1% по сравнению с точным обращением $\hat{\sigma}$. Видно, что возникает сильное отрицательное МС, пропорциональное $1 - e^{-B_0/B}$, $B_0 = 2\pi m c/(e\tau_q)$.

Рассмотрим магнетотранспорт в двухкомпонентной системе, состоящей из вырожденных электронов типов $\alpha = 1, 2$ в образце с дисками (см. рис. 1). Электроны двух типов различаются своими параметрами: плотностями n_0^α , эффективными массами m_α , скоростями Ферми $v_{F,\alpha}$, временами релаксации импульса τ_α . Как и в однокомпонентной системе, электроны обоих типов рассеиваются на дисках радиуса R , случайно расположенных в образце с плотностью n_d . Поэтому в отсутствии магнитного поля времена τ_α оцениваются как $\sim (Rn_d v_{F,\alpha})^{-1}$. Примером такой системы являются 2D электроны в двух стонеровских подзонах, расщепленных по спину за счет внешнего магнитного поля $B_{||}$ или внутреннего обменного взаимодействия. Здесь индекс α означает проекцию спина на ось квантования: $\alpha = \uparrow, \downarrow$, которая считается лежащей в плоскости двумерного слоя.

Будем считать, что наряду с рассеянием на дисках, возможны также медленные процессы межэлектронного рассеяния со скоростью Γ , приводящие к изменению типа частиц $\alpha \rightarrow \bar{\alpha}$ (здесь $\bar{\uparrow} = \downarrow$ и $\bar{\downarrow} = \uparrow$) и не приводящие к заметному перераспределению импульса. Такие процессы возможны за счет наличия спин-орбитального взаимодействия носителей в подзонах $\alpha = \uparrow, \downarrow$.

Разделим вклады путешествующих $\mathbf{j}^{\alpha,t}$ и зацикленных $\mathbf{j}^{\alpha,c}$ электронов в потоки \mathbf{j}^α . Основываясь на результатах работ [2, 3], не будем учитывать вклад электронов на розеточных траекториях, что качественно справедливо при не очень больших полях, когда $R_c \gg d$. При случайном расположении траекторий как для равновесных, так и для неравновесных электронов, вклады зацикленных и путешествующих электронов в концентрации n_0^α и δn_α пропорциональны множителям $P_\alpha = e^{-2\pi/(\omega_c^\alpha \tau_\alpha)}$ и $1 - P_\alpha$ соответственно. Транспортные уравнения примут вид

$$\frac{\partial \delta n_\alpha}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{j}^{\alpha,t} + \mathbf{j}^{\alpha,c}) = -\Gamma(\delta n_\alpha - \delta n_{\bar{\alpha}}), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{j}^{\alpha,t}}{\partial t} = \frac{e\mathbf{E}}{m_\alpha} n_0^\alpha (1 - P_\alpha) - [\boldsymbol{\omega}_c^\alpha \times \mathbf{j}^{\alpha,t}] - d_\alpha (1 - P_\alpha) \nabla \delta n_\alpha - \frac{\mathbf{j}^{\alpha,t}}{\tau_\alpha}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{j}^{\alpha,c}}{\partial t} = \frac{e\mathbf{E}}{m_\alpha} n_0^\alpha P_\alpha - [\boldsymbol{\omega}_c^\alpha \times \mathbf{j}^{\alpha,c}] - d_\alpha P_\alpha \nabla \delta n_\alpha. \quad (6)$$

Здесь $\boldsymbol{\omega}_c^\alpha = e\mathbf{B}/(m_\alpha c)$; коэффициенты сжимаемости $d_\alpha = v_{F,\alpha}^2/2$ связывают возмущения парциальных давлений и возмущения концентраций компонент: $\delta p_\alpha^t = d_\alpha \delta n_\alpha (1 - P_\alpha)$ и $\delta p_\alpha^c = d_\alpha \delta n_\alpha P_\alpha$. В уравнениях (5) и (6) новыми по сравнению с уравнениями работ [1–3] являются слагаемые $\sim (1 - P_\alpha) \nabla \delta n_\alpha$ и $\sim P_\alpha \nabla \delta n_\alpha$, которые описывают гидростатическую силу для электронов на “защелкнутых” и “путешествующих” траекториях.

Подчеркнем, что интенсивность межэлектронных столкновений в нашей модели определяется одним параметром $\Gamma \sim 1/\tau_{ee}^2$. При этом в уравнении (4) коэффициенты перед δn_α и $\delta n_{\bar{\alpha}}$ для простоты приняты одинаковыми по модулю. При условии $\tau \ll \tau_{ee}$ самым быстрым процессом является релаксация импульса при рассеянии на дисках, а релаксация других величин (например, сдвиговых напряжений) за счет межэлектронных столкновений является более медленной, поэтому в неравновесной функции распределения доминирует вклад, описывающий омиче-

²⁾Заметим также, что в отличие от работ [31, 32] мы не изучаем влияние зеемановского расщепления на скорость переходов Γ , считая поле $B_{||}$ фиксированным.

ский ток³⁾ (здесь τ – характерная величина времен τ_α). Как видно из работ [25, 26], нужно ожидать, что вклад этих эффектов в транспортные характеристики нашей системы окажется мал по параметру τ/τ_{ee} . С другой стороны, из рассмотрения работ [27–29] следует, что даже медленные переходы с изменением типа частиц являются сильным эффектом, определяющим профиль течения во всем образце за счет формирования прикраевых слоев с возмущенными плотностями и потоками шириной $\sim 1/\sqrt{\Gamma}$. Ниже мы покажем, что течения, описываемые моделью (4)–(6), приводят к двум типам сильного МС порядка единицы для узких и широких образцов, различие которых порядка их амплитуды. Таким образом, изучаемый эффект является не малым по параметру $\tau/\tau_{ee} \ll 1$.

Кроме того, в двухкомпонентной системе существуют термические флуктуации плотности электронов и соответствующее флуктуационное электрическое поле. В работах [7–9] был изучен эффект памяти в магнетотранспорте для 2D электронов в объемном образце при наличии локализованных дефектов и плавного статического беспорядка. Аналогичным образом, флуктуационное электрическое поле влияет на движение электронов на циклотронных орбитах между столкновениями с дисками. Оно может помешать электрону снова попасть на диск после циклотронного оборота или, наоборот, дать “прилипнуть” заикленному электрону. При достаточно большом радиусе дисков такое воздействие флуктуаций плотности на рассматриваемые ЭП относительно слабо. Оценки статического и динамического корреляторов флуктуаций плотности, а также соответствующих флуктуационного электрического поля и величины возмущения циклотронных траекторий, полученные для 2D электронов на основе подхода, изложенного в книгах [33] и [34], дают критерий применимости нашего рассмотрения ЭП: $R \gg R_0$, где $R_0 \sim r_s[\varepsilon_F/(\hbar\omega_c)]^{1/2}a_0$, $r_s \sim n_0^{-1/2}$ – параметр, равный отношению величины кулоновского взаимодействия к кинетической энергии электронов; ε_F – энергия Ферми; $a_0 \sim n_0^{-1/2}$ – среднее расстояние между электронами. Предполагается, что значения всех величин r_s , ε , a_0 , ω_c , n_0 для компонент $\alpha = \uparrow, \downarrow$ имеют один и тот же порядок величины. В рамках нашего рассмотрения величина $\varepsilon_F/(\hbar\omega_c)$ должна быть достаточно большой, чтобы квантование состояний

³⁾“Пред-гидродинамические” поправки к эффекту Холла и МС от межэлектронных столкновений, “защищающих” электроны от потери импульса при рассеянии на шероховатостях краев образца, были рассмотрены в работах [25, 26] для баллистических образцов.

электронов было несущественным. Для параметров образцов с отверстиями, изученных в эксперименте [17], неравенство $R \gg R_0$ выполняется, начиная с магнитных полей ~ 10 мТл.

Подчеркнем также, что даже при весьма низких температурах и медленных межэлектронных столкновениях, когда параметр $\Gamma = \Gamma(T)$ становится мал, изучаемые здесь ЭП остаются велики, а именно, как отмечалось выше, амплитуда магнетосопротивления меняется на величину порядка единицы, когда характерная микроскопическая длина релаксации v_F/Γ относительно переходов “ $\alpha \rightarrow \bar{\alpha}$ ” изменяется от значения меньше до значений больше макроскопического параметра W^2/l : $v_F/\Gamma \gg W^2/l$. Поэтому в достаточно широких образцах магнетотранспорт определяется переходами $\alpha \rightarrow \bar{\alpha}$ даже при очень малых интенсивностях переходов $\Gamma(T)$.

Электрическое поле \mathbf{E} , входящее в (5) и (6), состоит из внешнего приложенного поля \mathbf{E}_0 и внутреннего поля \mathbf{E}_{int} , определяемого возмущением электрического заряда (здесь имеются в виду средние значения полей). Последний пропорционален общей возмущенной плотности двух компонент электронной жидкости $\delta n = \delta n_1 + \delta n_2$. Например, для достаточно медленных течений в структуре с затвором на расстоянии Δz от двумерного слоя, отделенного от него средой с диэлектрической проницаемостью κ , действует “приближение плавного канала”. В нем связь поля и плотности заряда локальна: $\mathbf{E}_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = -(4\pi e\Delta z/\kappa)\nabla\delta n(\mathbf{r}, t)$. В структурах без затвора эта связь нелокальна, в них также могут быть важны эффекты электромагнитного запаздывания для быстроосциллирующих течений [35].

Уравнения (4)–(6) необходимо дополнить граничными условиями на закрытых краях образца

$$(\mathbf{j}^\alpha \cdot \mathbf{n})|_{\partial G^c} = 0, \quad (7)$$

где \mathbf{n} – нормаль к краю образца ∂G^c . Решение сформулированной краевой задачи (или краевой с начальным условием при $t = 0$ для нестационарных течений) выполняется стандартными математическими методами (см., например, [27–29, 36]).

3. Стационарные течения в полоске. Рассмотрим образец с дисками в форме длинной полоски шириной $W \gg d$ с закрытыми продольными краями. Направим ось x вдоль длинных краев образца, а ось y – перпендикулярно им (см. рис. 1). В такой геометрии неизвестными функциями будут $\mathbf{j}^{\alpha,c}(y)$, $\mathbf{j}^{\alpha,t}(y)$, $\delta n_\alpha(y)$. Внешнее поле \mathbf{E}_0 направлено вдоль образца. Тогда уравнение электростатики и граничные условия приобретут вид $E_y = -(4\pi e\Delta z/\kappa)\delta n'$ и $j_y^\alpha|_{y=\pm W/2} = 0$ (штрих означает производную по y).

Для большей ясности формул пишем ниже $\alpha = \downarrow, \uparrow$, хотя рассмотрение справедливо для произвольной двухкомпонентной системы, не обязательно стеновской.

Система уравнений (4)–(6) сводится к двум обыкновенным дифференциальным уравнениям второго порядка для величин $\delta n_\alpha(y)$. В ее решении появляется характерная длина $l_R = 1/\lambda$, где $\lambda = \lambda(B)$ – одно из собственных чисел характеристического уравнения, $\lambda^2 = \Gamma(\sigma_{xx}^\uparrow + \sigma_{xx}^\downarrow)/(\sigma_{xx}^\downarrow D_{xx}^\uparrow + \sigma_{xx}^\uparrow D_{xx}^\downarrow)$. Здесь $\sigma_{xx}^\alpha = \sigma_0^\alpha(1 - P_\alpha)/(1 + \beta_\alpha^2)$ – продольные проводимости компонент жидкости с учетом ЭП; $\beta_\alpha = \omega_c^\alpha \tau_\alpha$ – безразмерные магнитные поля, $\sigma_0^\alpha = e^2 n_0^\alpha \tau_\alpha / m_\alpha$ – проводимости компонент в нулевом магнитном поле; $D_{xx}^\alpha = (D_0^\alpha/2)(1 - P_\alpha)/(1 + \beta_\alpha^2)$ – величины, аналогичные коэффициентам диффузии компонент жидкости и учитывающие ЭП, $D_0^\alpha = v_{F,\alpha}^2 \tau_\alpha / 2$ – коэффициенты диффузии компонент в нулевом магнитном поле. Второе собственное число системы уравнений для $\delta n_\alpha(y)$ равно нулю, $\lambda = 0$, что приводит к линейному закону распределения плотности $e[\delta n_\uparrow(y) + \delta n_\downarrow(y)]$ заряда в узких образцах. В результате, решение системы (4)–(6) состоит из функций y и $\cosh(\lambda y)$.

В широких образцах, $W \gg l_R$, в объеме отсутствует y -компонента полного потока частиц $j_y = j_y^\uparrow + j_y^\downarrow$ благодаря сохранению электрического заряда. При этом, в связи с различием сил трения и сил Лоренца, которые действуют на электроны разных компонент жидкости, оказываются отличными от нуля потоки каждой из компонент $j_y^\alpha(y)$. Это приводит к ненулевому “току дисбаланса” в направлении от одного края к другому: $J = j_y^\uparrow - j_y^\downarrow \neq 0$. В результате формируются прикраевые слои шириной l_R (см. левую панель рис. 1), в которых возникают избыточные или недостаточные плотности $\delta n_\alpha(y)$. Такое распределение величин j_y^α и δn_α похоже на их распределение в электрон-дырочных системах без учета ЭП [27–29], и в двухкомпонентной вязкой электронной жидкости [36].

Особенностью рассматриваемой системы является то, что вся картина, в частности, ширина l_R , определяется ЭП. В частности, в пределе классически больших магнитных полей, $\beta_\alpha \gg 1$, имеем для l_R

$$l_R \approx \sqrt{\frac{2\pi}{\Gamma} \frac{\sigma_0^\uparrow D_0^\downarrow + \sigma_0^\downarrow D_0^\uparrow}{\sigma_0^\uparrow (\beta_\downarrow)^3 + \sigma_0^\downarrow (\beta_\uparrow)^3}} \sim \frac{1}{B^{3/2}}. \quad (8)$$

Это выражение отлично от вида рекомбинационной ширины, $l_R \sim 1/B$, в системах с дефектами, не приводящими к ЭП [27–29]. В силу медленности переходов с изменением типа частиц, длина l_R может быть весьма большой в малых магнитных полях. Как вид-

но из (8), величина l_R сильно падает с ростом магнитного поля.

В узких образцах, $W \ll l_R$, медленные переходы с изменением типа частиц не успевают привести к установлению баланса между потоками частиц, возникающими от сил Лоренца и релаксации импульса. Течение каждой из компонент оказывается независимым от течения другой компоненты. Для установления нулевых потоков $j_y^\alpha = 0$ в направлении y каждой из компонент в дополнение к силе Лоренца, связанной с возмущением плотности, устанавливаются также линейные по координате возмущения концентраций каждой из компонент жидкости $\delta n_\alpha \sim y$ (это схематично проиллюстрировано на правой панели рис. 1).

С ростом магнитного поля эффективность процессов перехода с изменением типа частиц увеличивается за счет циклотронного вращения электронов в жидкости и их более продолжительного нахождения в заданном малом объеме. Из формулы (8) видно, что с ростом магнитного поля исходно узкий образец в нулевом поле, $W \ll l_{R|B=0}$, становится широким в смысле неравенства $W \gg l_R(B)$ с ростом магнитного поля. В таком образце основной вклад в ток и холловское поле дается объемной областью $W/2 - |y| \gg l_R$ и описывается формулами Друде.

Расчет $\mathbf{j}^{\alpha,c,t}(y)$ и $\delta n_\alpha(y)$ дает следующий результат для полного тока I_x в двух предельных случаях:

$$\frac{I_x}{E_0 W} = \begin{cases} \sigma_{xx} + \sigma_{xy}^2 / \sigma_{xx}, & W \gg l_R \\ 1 / \varrho_{xx}^\uparrow + 1 / \varrho_{xx}^\downarrow, & W \ll l_R \end{cases}, \quad (9)$$

где $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^\uparrow + \sigma_{xx}^\downarrow$ и $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^\uparrow + \sigma_{xy}^\downarrow$ – общие продольная и холловская проводимости жидкости. Для холловских компонент получено выражение $\sigma_{xy}^\alpha = (\beta_\alpha + \Delta\beta_\alpha) \sigma_{xx}^\alpha$, где $\Delta\beta_\alpha = P_\alpha(1 + \beta_\alpha^2)/[\beta_\alpha(1 - P_\alpha)]$. Величины $\varrho_{xx}^\alpha = \sigma_{xx}^\alpha / [(\sigma_{xx}^\alpha)^2 + (\sigma_{xy}^\alpha)^2]$ – продольные удельные сопротивления каждой из компонент жидкости. Первая строка в (9) отвечает применению обычных объемных формул для тензора проводимости двухкомпонентной системы: $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_\uparrow + \hat{\sigma}_\downarrow$. Вторая строка в (9) отвечает течению двух независимых потоков жидкости в холловском образце, для каждой из которых формируется свое эффективное холловское поле, равное сумме E_y и величин, пропорциональным градиентам парциальных давлений $p'_\alpha \sim \delta n'_\alpha$.

Приведем результат для холловского поля:

$$\frac{E_y}{E_0} = \begin{cases} \sigma_{xy} / \sigma_{xx}, & W \gg l_R \\ \frac{\sigma_0^\uparrow \sigma_{xy}^\uparrow / \sigma_{xx}^\uparrow + \sigma_0^\downarrow \sigma_{xy}^\downarrow / \sigma_{xx}^\downarrow}{\sigma_0^\uparrow + \sigma_0^\downarrow}, & W \ll l_R \end{cases}. \quad (10)$$

Первая строка формулы (10) отвечает применению объемных формул Друде для получения критерия отсутствия полного потока в направлении y : $j_y = j_y^\uparrow + j_y^\downarrow = 0$. Вторая формула выводится из уравнения, описывающего баланс сил, действующих на двухкомпонентную жидкость в направлении y при отсутствии каждого из потоков j_y^α .

4. Обсуждение результатов. Введем для удобства представления и анализа результатов два параметра асимметрии тензора проводимости разных компонент электронной жидкости. Первый параметр ξ определяется формулой

$$\sigma_0^{\uparrow,\downarrow} = \sigma_0(1 \pm \xi), \quad (11)$$

где $\sigma_0 = (\sigma_0^\uparrow + \sigma_0^\downarrow)/2$. Второй параметр асимметрии η описывает различие безразмерного магнитного поля $\beta_\alpha = \omega_c^\alpha \tau_\alpha$ в двух спиновых подсистемах

$$\beta_{\uparrow,\downarrow} = \beta_0(1 \pm \eta). \quad (12)$$

Здесь $\beta_0 = (\beta_0^\uparrow + \beta_0^\downarrow)/2$.

Отметим, что в случае $\eta = 0$ (при $\xi \neq 0$) кривая МС имеет универсальный характер и повторяет таковую для однокомпонентного двумерного электронного газа [формула (3)]: $\rho_{xx} = (1 - P)/(2\sigma_0)$, где $P = P_\alpha$ для $\alpha = \uparrow, \downarrow$; $2\sigma_0$ – полная проводимость системы при $B = 0$. Видно, что полученное сопротивление не зависит от величины ξ . Для двумерного электронного газа с параболическим спектром в наклонном магнитном поле параметр ξ определяется компонентой поля в плоскости движения: $\xi \propto B_\parallel$. Из уравнения $\rho_{xx} = (1 - P)/(2\sigma_0)$ и формулы для σ_0 видно, что кривая МС не зависит от зеемановского расщепления в данном случае.

На рисунке 2 представлены зависимости МС для обоих ненулевых параметров асимметрии $\xi \neq 0$ и $\eta \neq 0$. Зависимость $\rho_{xx}(B)$ становится немонотонной, т.е. МС $[\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)]/\rho_{xx}(0)$ приобретает знакопеременный характер. Положительный участок МС для широких образцов ($W \gg l_R$) в малых магнитных полях обусловлен установлением потоков \mathbf{j}^α двух компонент в соответствии с обычной теорией Друде без ЭП (см., например, обсуждение аналогичного МС для электрон-дырочной системы в работе [28]). Отрицательный участок обусловлен ЭП, т.е. уменьшением долей $1 - P_\alpha$ путешествующих электронов обоих типов $\alpha = \uparrow, \downarrow$ с ростом поля B . Аналогичное знакопеременное МС было предсказано для объемных 3D материалов со статическими протяженными дефектами в работе [37].

В узких образцах ($W \ll l_R$), когда переходы с изменением типа электронов не успевают сформиро-

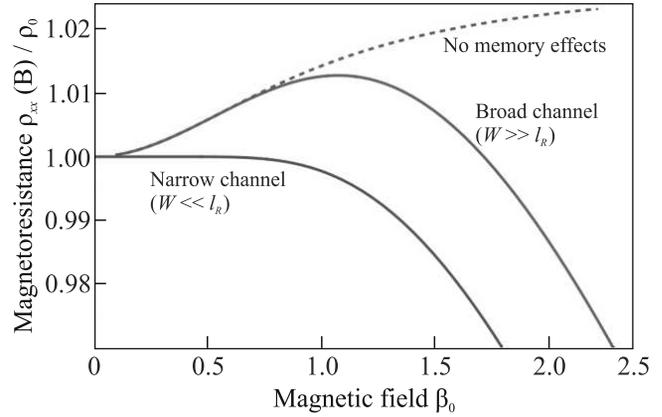


Рис. 2. (Цветной онлайн) МС широкого и узкого образцов графена в наклонном поле \mathbf{B} . Расчет выполнен для параметров, описанных в разделе “5”

вать единую жидкость, течение каждой из компонент является независимым и описывается собственными проводимостями и сопротивлениями с учетом ЭП: $\varrho_{xx} = [(\varrho_{xx}^\uparrow)^{-1} + (\varrho_{xx}^\downarrow)^{-1}]^{-1}$. Такое МС оказывается строго отрицательным (см. рис. 2).

5. Величина предсказанного МС для некоторых конкретных материалов. Рассмотрим вырожденные двумерные электроны в расщепленных по спину подзонах в графене. Благодаря высокому качеству графеновых структур, в них был надежно реализован гидродинамический режим транспорта в достаточно широких образцах, $W \gg l_{ee}$, а также в узких образцах, $W \ll l_{ee}$, при высоких магнитных полях, $W \gg R_c$ [18, 19]. Наличие естественных или искусственных макродефектов в таких образцах (дисков, отверстий) должно привести к перестройке типа транспортного режима и, в первом приближении, замене W на d или d^2/R во всех описывающих транспорт соотношениях. Экспериментальное изучение рассмотренных выше эффектов в системе слабо взаимодействующих электронов в графене в двух зеемановских подзонах $\alpha = \downarrow, \uparrow$ представляется перспективным для изучения роли и параметров межэлектронных столкновений. В частности, измерение МС и эффекта Холла для наборов образцов с разными W и d может позволить определить параметры системы, в частности, скорость рассеяния с переворотом спина Γ .

Спектр электронов в графене в магнитном поле B_\parallel , параллельном его плоскости, имеет вид: $\varepsilon_p^{\uparrow,\downarrow} = v_F p \pm \Delta/2$, где $v_F = 10^8$ см/с, $\Delta = \mu_B g_e B_\parallel$ – зеемановское расщепление при $B_\parallel \gg B$. Время рассеяния на классических рассеивателях $\tau_\alpha = \tau = 1/(n_d v_F R)$ не зависит от спинового индекса α . Продольную проводимость для двух спиновых подзон можно пред-

ставить в виде $\sigma_0^{\uparrow,\downarrow} = \sigma_0 (1 \mp \xi)$, где $\sigma_0 = e^2 \tau E_F / 4\pi \hbar^2$ и $\xi = \Delta / (2E_F)$. Циклотронная частота в двух спиновых подзонах есть: $\omega_c^{\uparrow,\downarrow} = eBv_F / cp_{\uparrow,\downarrow}$, где $p_{\uparrow,\downarrow} = v_F^{-1} (E_F \mp \Delta/2)$. Из соотношения $\omega_c^{\uparrow,\downarrow} \tau \approx \omega_0 \tau (1 \pm \xi)$ получаем: $\eta = -\xi = -\Delta / 2E_F$. Для энергии Ферми $E_F = 5$ мэВ, поля в плоскости $B_{\parallel} = 15$ Тл и g -фактора $g_e \approx 2$ получается $\xi = 0.17$. МС для этих параметров представлено на рис. 2. Для такого параметра асимметрии $\xi = 0.17$ величина положительного МС достигает нескольких процентов.

В двухкомпонентной системе, сформированной из 2D электронов в расщепленной по спину подзоне квантовой ямы GaAs, где g -фактор электрона имеет величину $g \approx 0.44$, для тех же значений E_F и B_{\parallel} параметр η оказывается значительно меньшим: $\eta = \Delta / 4E_F \approx 0.04$. Поэтому для наличия заметного участка положительного МС требуются гораздо большие магнитные поля B_{\parallel} (десятки Тесла). Отметим, что в эксперименте [17] по магнетотранспорту в таких ямах с локализованными макродефектами (круглыми отвестиями) при приложении весьма больших магнитных полей, $B_{\parallel} \approx 12$ Тл, на кривых отрицательного МС $\rho_{xx}(B)$, вероятно, наблюдалось зарождающееся положительное МС при малых B : выполаживание $\rho_{xx}(B)$ в окрестности $B = 0$ и появление слабо растущего участка у $\rho_{xx}(B)$. Разумно ожидать, что в больших полях B_{\parallel} наблюдавшееся МС должно развиваться в предсказанное знакопеременное МС, показанное на рис. 2. Однако в связи с малостью параметра η для 2D электронов в ямах GaAs для этого требуются очень большие поля B_{\parallel} .

Таким образом, структуры на основе чистого графена представляются более перспективными для исследования магнетотранспорта с макродефектами, чем изученные в работе [17] образцы на основе квантовых ям GaAs. Кроме относительно большой величины параметра η , в графене скорость частиц не зависит от положения энергии Ферми. В результате в выражениях как для транспортного, так и для уходно-временен рассеяния на дисках τ_{α} и $\tau_{q,\alpha}$ не зависят от спинового индекса α , что сильно упростит анализ возможных экспериментов.

Работа выполнена за счет гранта # 18-72-10111-П Российского научного фонда (аналитическая теория).

П. С. Алексеев и К. С. Денисов благодарят Фонд развития теоретической физики и математики "Базис".

1. E. M. Baskin, L. N. Magarill, and M. V. Entin, *Sov. Phys. JETP* **48**, 365 (1978).

2. A. V. Bobylev, F. A. Maa, A. Hansen, and E. H. Hauge, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 197 (1995).

3. A. V. Bobylev, F. A. Maa, A. Hansen, and E. H. Hauge, *J. Stat. Phys.* **87**, 1205 (1997).

4. A. Dmitriev, M. Dyakonov, and R. Jullien, *Phys. Rev. B* **64**, 233321 (2001).

5. A. Dmitriev, M. Dyakonov, and R. Jullien, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 266804 (2002).

6. V. V. Cheianov, A. P. Dmitriev, and V. Yu. Kachorovskii, *Phys. Rev. B* **70**, 245307 (2004).

7. D. G. Polyakov, F. Evers, A. D. Mirlin, P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **64**, 205306 (2001).

8. A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, F. Evers, and P. Wölfle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 126805 (2001).

9. F. Evers, A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, and P. Wölfle, *Physica E* **12**, 260 (2002).

10. L. Bockhorn, P. Barthold, D. Schuh, W. Wegscheider, and R. J. Haug, *Phys. Rev. B* **83**, 113301 (2011).

11. A. T. Hatke, M. A. Zudov, J. L. Reno, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **85**, 081304 (2012).

12. L. Bockhorn, I. V. Gornyi, D. Schuh, C. Reichl, W. Wegscheider, and R. J. Haug, *Phys. Rev. B* **90**, 165434 (2014).

13. R. G. Mani, A. Kriisa, and W. Wegscheider, *Sci. Rep.* **3**, 2747 (2013).

14. Q. Shi, P. D. Martin, Q. A. Ebner, M. A. Zudov, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **89**, 201301 (2014).

15. X. Wang, P. Jia, R. R. Du, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **106**, L241302 (2022).

16. P. S. Alekseev, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 166601 (2016).

17. B. Horn-Cosfeld, J. Schluck, J. Lammert, M. Cerchez, T. Heinzl, K. Pierz, H. W. Schumacher, and D. Mailly, *Phys. Rev. B* **104**, 045306 (2021).

18. J. A. Sulpizio, L. Ella, A. Rozen et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 75 (2019).

19. M. J. H. Ku, T. X. Zhou, Q. Li et al. (Collaboration), *Nature* **583**, 537 (2020).

20. G. M. Gusev, A. D. Levin, E. V. Levinson, and A. K. Bakarov, *Phys. Rev. B* **98**, 161303 (2018).

21. T. Scaffidi, N. Nandi, B. Schmidt, A. P. Mackenzie, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 226601 (2017).

22. T. Holder, R. Queiroz, T. Scaffidi et al. (Collaboration) *Phys. Rev. B* **100**, 245305 (2019).

23. A. N. Afanasiev, P. S. Alekseev, A. A. Greshnov, and M. A. Semina, *Phys. Rev. B* **104**, 195415 (2021).

24. А. Н. Афанасьев, П. С. Алексеев, А. А. Грешнов, М. А. Семина, *ФТП* **55**, 566 (2021).

25. P. S. Alekseev and M. A. Semina, *Phys. Rev. B* **98**, 165412 (2018).

26. P. S. Alekseev and M. A. Semina, *Phys. Rev. B* **100**, 125419 (2019).

27. P. S. Alekseev, A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Yu. Kachorovskii, B. N. Narozhny, M. Schutt, and M. Titov, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 156601 (2015).
28. P. S. Alekseev, A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Yu. Kachorovskii, B. N. Narozhny, M. Schutt, and M. Titov, *Phys. Rev. B* **95**, 165410 (2017).
29. П. С. Алексеев, И. В. Горный, А. П. Дмитриев, В. Ю. Качоровский, М. А. Семина, *ФТП* **51**, 798 (2017).
30. Y. Dai, K. Stone, I. Knez et al. (Collaboration) *Phys. Rev. B* **84**, 241303 (2011).
31. O. V. Dimitrova and V. E. Kravtsov, *JETP Lett.* **86**, 670 (2007).
32. N. M. Chtchelkatchev and I. S. Burmistrov, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 206804 (2008).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976).
34. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, М. (1976).
35. В. И. Фалько, Д. Е. Хмельницкий, *ЖЭТФ* **95**, 1988 (1989).
36. П. С. Алексеев, *ФТП* **56**, 866 (2022).
37. K. S. Denisov, K. A. Baryshnikov, P. S. Alekseev, and N. S. Averkiev, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 385802 (2021).

Каскадное образование топологических дефектов и сателлитных капель при динамической капиллярной неустойчивости в жидких кристаллах

П. В. Долганов⁺¹⁾, Н. А. Спириденко⁺, В. К. Долганов⁺, Е. И. Кац^{*}, К. Д. Бакланова^{+×}

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

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

[×]Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 июня 2023 г.

После переработки 15 июня 2023 г.

Принята к публикации 16 июня 2023 г.

Обнаружено образование топологических дефектов на границе нематик–изотропная жидкость и вблизи сателлитных капель при разрыве и фрагментации перешейка изотропной фазы между областями нематика. Этот процесс реализован в тонких оптических ячейках, заполненных жидким кристаллом. Найдена критическая ширина перешейка, при которой имеет место универсальная зависимость его ширины от времени, определяемая значением капиллярной скорости (отношение поверхностного натяжения к вязкости).

DOI: 10.31857/S1234567823140094, EDN: gzlpgy

Введение. Исследование разрыва струи жидкости является одним из наиболее старых и в то же время актуальных направлений динамики жидкости. Первое дошедшее до нас описание этого явления было сделано Леонардо да Винчи [1, 2]. Он сделал зарисовку струи, распадающейся на капли, и привел оригинальное для того времени объяснение причины образования капель. И в настоящее время изучение разрыва тонких струй остается интересным и актуальным направлением в физике жидкостей, лежит в основе многих природных явлений, встречается в повседневной жизни, важно для многих технических приложений. Для простых изотропных жидкостей теория была построена Рэлеем [3] и, с учетом вязкости, Бором [4]. Мы кратко напомним физическую природу разрыва струй в изотропных жидкостях [1–5]. Цилиндрический образец изотропной жидкости очевидным образом стремится минимизировать свою поверхностную энергию разбиением на капли. Динамика процесса определяется балансом между поверхностным натяжением, вязкими и инерционными силами (для интересующих нас размеров можно пренебречь гравитационными силами). В этом случае поведение системы определяется безразмерным числом Онезорге $Oh = \mu/\sqrt{\rho\gamma R}$, где μ – динамическая вязкость жидкости, ρ – плот-

ность, γ – поверхностное натяжение и R – характеристический размер системы [6]. Было показано (Плато, Рэлей [3, 5]), что тонкая струя нестабильна, если отношение ее радиуса r_0 к длине l достаточно мало. При этом флуктуации с длиной волны больше чем критическая $\lambda_c = 2\pi r_0$ понижают энергию системы, амплитуда модуляции растет, что и приводит к разрыву струи. Релей учел динамику потока невязкой жидкости в струе и нашел в линейном приближении, что максимальный инкремент неустойчивости имеет возмущение с длиной волны $\lambda_R \approx 9r_0$. Нестабильность, приводящая к разрыву, была названа нестабильностью Рэлей–Плато. Впоследствии было показано, что вязкость, нелинейные эффекты и окружающая жидкий цилиндр среда могут существенно влиять на λ_c . Увеличение вязкости сдвигает длину волны с максимальным инкрементом неустойчивости к большим длинам волн и приводит к возбуждению гармоник меньше рэлеевских. Теория капиллярного разрыва перешейка между двумя жидкими каплями [6–16] предсказывает на конечной стадии разрыва струи универсальное поведение. При этом профиль границы раздела имеет масштабно-инвариантный универсальный вид [17]. Линейная теория применима только на начальном этапе развития неустойчивости. На конечных стадиях процесса возникают два экстремума по диаметру перешейка между каплями с линейной зависимостью

¹⁾e-mail: pauldol@issp.ac.ru

минимального радиуса $r_{\min} = At\gamma/\mu$ от времени, где A – постоянный множитель. В свою очередь наличие двух минимумов свидетельствует об образовании капель при разрыве [17]. Нелинейные эффекты приводят также к смешиванию гармоник и к возможности образования капель с размерами, существенно меньшими, чем r_0 (и, следовательно, с большой кривизной). В экспериментах, проводимых в последнее десятилетие, исследовалось образование капель при разрыве [13, 16, 18–20], в том числе каскадное образование спутанных капель, при котором при разрыве возникают капли неравновесной формы с их последующим делением и образованием новых капель (самоподобное скейлинговое поведение). Сингулярность в форме перешейка, образующаяся при разрыве, исчезает после разрыва.

В настоящей работе проведены исследования разрыва тонкой линейного типа прослойки (перешейка) изотропной жидкости между двумя областями нематического жидкого кристалла в плоских оптических ячейках. В отличие от простых изотропных жидкостей, в жидком кристалле имеется ориентационный порядок. Поэтому изменение конфигурации (формы) системы приводит к изменению в нематике упругой ориентационной энергии Франка, энергии сцепления директора с границей раздела. Эти явления в свою очередь приводят к возможности образования топологических дефектов, оптимизирующих энергетический баланс при разрыве жидкого перешейка. В данной работе обнаружено и исследовано образование топологических дефектов на границе раздела жидкость – нематик. Эти топологические дефекты возникают как следствие формальной сингулярности формы (стремящейся к бесконечности кривизны перешейка вблизи разрыва). Важно отметить, что устранение топологических дефектов возможно только при изменении топологии образца, поэтому дефекты сохраняются после их образования. Нами также изучена динамика утоньшения, связанная с капиллярной нестабильностью перешейка.

Детали эксперимента. В измерениях мы использовали нематический жидкий кристалл E7 (Synthon Chemicals). Нематические жидкие кристаллы обладают ориентационным упорядочением молекул. Преимущественное направление длинных осей молекул называется директором [21–23]. При нагреве нематик переходит в изотропную жидкость. Наши образцы имели широкую двухфазную область нематик – изотропная жидкость ($\sim 2^\circ\text{C}$), что позволило готовить длинные прослойки жидкости между областями нематика и исследовать их разрыв. Использовались плоские оптические

ячейки из двух параллельных стеклянных пластинок. Поверхности ячеек задавали однородную ориентацию молекул, параллельную поверхности. Вещество в изотропной фазе капиллярно вводилось в ячейку. Затем ячейка помещалась в термостатирующее устройство (Linkam LTS120 или Mettler Toledo FP90). Вязкость μ как в нематическом, так и в изотропном состоянии достаточно высокая, поверхностное натяжение γ границы нематик–изотропная жидкость небольшое, их отношение (капиллярная скорость) $\gamma/\mu \sim 5 \cdot 10^{-4}$ м/с, что позволяет проводить исследования при сравнительно небольших скоростях съемки. Исследования проводились в поляризованном свете с использованием микроскопа Olympus BX51. Эволюция структур регистрировалась контролируемой компьютером видеокамерой (Baumer VCXU-02C) со скоростью съемки до 400 кадров в секунду. Тонкая изотропная прослойка получалась следующим образом. Ячейка с жидким кристаллом нагревалась до температуры несколько выше температуры, при которой весь образец переходил в изотропное состояние. Затем образец медленно охлаждался, в нем зарождались и росли участки нематика. При температуре вблизи перехода всего образца в нематическую фазу могли образовываться тонкие изотропные прослойки почти линейного вида (рис. 1), которые разделяли нематические области. Трансформация этих прослоек, связанная с капиллярной нестабильностью, была основной целью исследований.

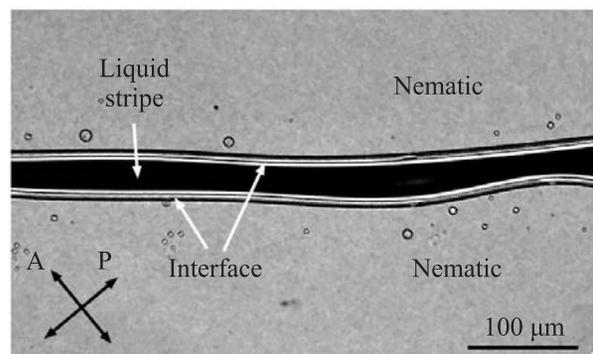


Рис. 1. Жидкая прослойка в низкотемпературной части двухфазной области разделяет два участка нематической фазы. Большая часть материала перешла в нематическую фазу. Толщина ячейки $h = 20$ мкм

Результаты. В прослойке между нематическими областями (рис. 1, 2а) можно выделить три участка, ясно видимых при наблюдении в скрещенных поляризаторах: центральная темная часть (изотропная жидкость) и две светлые полосы по краям –

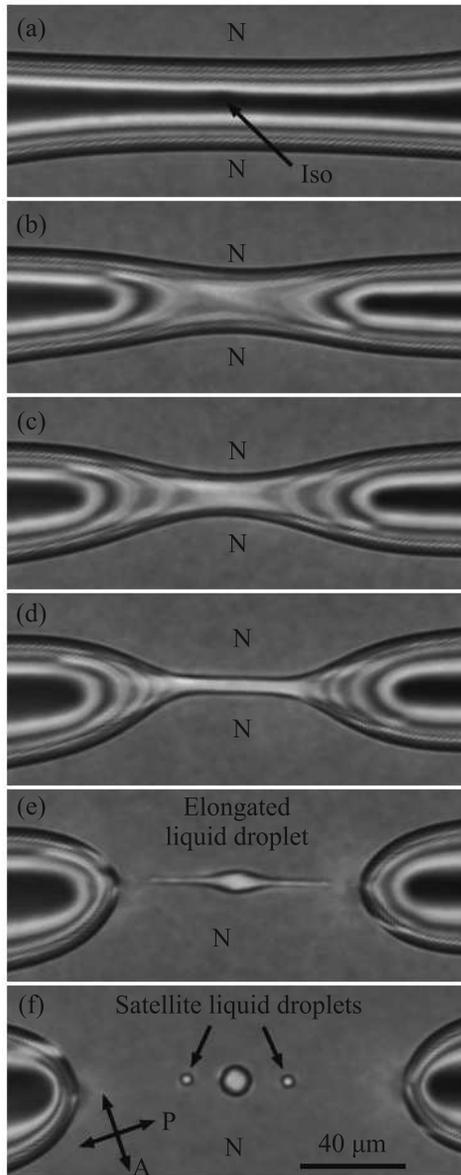


Рис. 2. (Цветной онлайн) Область прослойки, где происходит ее разрушение. (a) – Ширина прослойки больше чем суммарная ширина двух менисков. (b)–(d) – Образование мостика почти одинаковой ширины. (e), (f) – Фрагментация мостика с образованием сателлитных капель. Времена после фото (a): 11.42 с (b), 12.0 с (c), 12.41 с (d), 12.7 с (e), 13.06 с (f). $h = 40$ мкм

два мениска, разделяющих изотропную жидкость и нематик. Если мениски не соприкасаются, ширина прослойки может изменяться при изменении температуры или при движении материала в ячейке. Если мениски касаются, наблюдается неустойчивость ширины прослойки. Ширина ее локально начинает уменьшаться. На рисунке 2a показана прослойка непосредственно перед моментом соединения менисков. Кадры на рис. 2b–d демонстрируют утоньше-

ние прослойки с образованием тонкого мостика. Процесс утоньшения становится необратимым. Вначале утоньшение происходит с явно выраженным минимумом, локализованным в месте, где мениски соединяются. Затем по бокам скорость утоньшения увеличивается с образованием тонкого мостика примерно одинаковой ширины (рис. 2d) между широкими частями прослойки, ширины которых изменяются мало. Они несколько увеличиваются за счет перемещения материала из центральной части.

После того как образуется мостик почти постоянной ширины, процесс утоньшения кардинально изменяется (рис. 2d–f). Вначале мы обсудим разрывы и более подробно особенности разрыва, которые при образовании сателлитных капель ранее не наблюдались, а затем динамику утоньшения.

Мостик на рис. 2(d) почти постоянной ширины, как и перешеек в начальном состоянии, однако теперь его ширина существенно меньше, что может инициировать неустойчивость типа Рэлея–Плато. Неустойчивость тонкого мостика возникает, когда отношение длины мостика l к его полуширине r_0 становится $l/r_0 \sim 10$, т.е. на длине укладывается рэлеевская длина волны $\lambda_R \approx 9r_0$. Неустойчивость с модуляцией ширины происходит так, что минимумы ширины образуются по краям мостика, максимум в центре. Мостик разрывается в двух местах на его краях (рис. 2e). На рисунке 3 схематически пока-

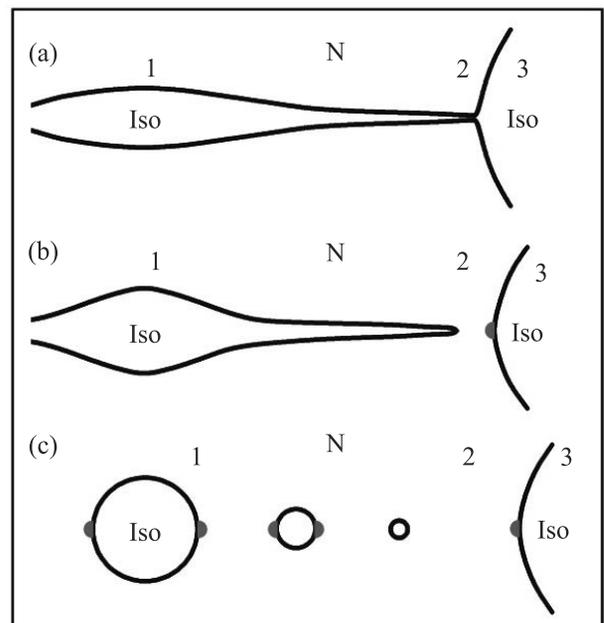


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематическое изображение мостика до разрыва (a), после первого разрыва (b) и сателлитных капель после каскада разрывов (c). Красными точками показаны топологические дефекты

зана правая часть интерфейса до разрыва мостика (рис. 3а) и непосредственно после разрыва (рис. 3б). Наклон интерфейса со стороны образующейся капли (1) существенно меньше наклона в остающейся части перешейка (3). Непосредственно перед разрывом увеличение кривизны на двух боковых краях мостика ведет к сингулярности в его форме (область (2) на рис. 3а) [17, 24]. В результате разрыва в середине образуется продолговатая капля с вытяженными концами (рис. 2е, 3б). Однако эта капля, как правило, не успевает релаксировать к круглой форме. Два вторичных разрыва происходят с двух сторон в вытянутых продолговатых участках капли. В результате образуются еще две меньшие боковые спутные капли (рис. 2ф). Самоподобные разрывы могут продолжаться и далее. Разрешение оптического микроскопа не позволяет проследить разрывы и образование очень мелких капель. Капли могут находиться в нематике или на поверхности кюветы. Наименьшие наблюдаемые нами капли имели диаметр порядка 1 мкм. Разрыв мостика с формированием спутных капель подобен разрыву цилиндрической струи жидкости [6, 12, 25], разрыву перешейка между твердыми пластинками или каплями [8, 9, 26].

Нами обнаружено, что сингулярность в форме мостика и гидродинамическое течение жидкости вблизи сингулярности приводят к образованию топологических дефектов на границе нематик–изотропная жидкость при образовании спутных капель. Дефекты могут быть визуализированы при наблюдении в скрещенных поляризаторах (рис. 4). Рисунок 4а–с демонстрирует разрыв прослойки изотропной жидкости. На рисунке 4с дефекты видны на границе интерфейса с двух сторон расширяющегося участка нематической фазы. Деформация распространяется вглубь мениска. Число и размер образующихся капель могли отличаться от эксперимента к эксперименту. На рисунке 4д, е приведены фотографии центральной капли и спутных капель для случаев образования небольшого и большого числа спутных капель. Часть спутных капель имеют больший размер, чем на рис. 4с. Топологические дефекты (рис. 4д, е) хорошо видны как на границе центральной капли, так и больших спутных капель. Топологические дефекты в центральной и спутных каплях, насколько нам известно, ранее не наблюдались.

Существование топологических дефектов на границе капель связано с ориентацией молекул жидкого кристалла на границе нематик–изотропная жидкость. Согласно теореме Пуанкаре–Хопфа [22] на сферической поверхности с планарной ориентаци-

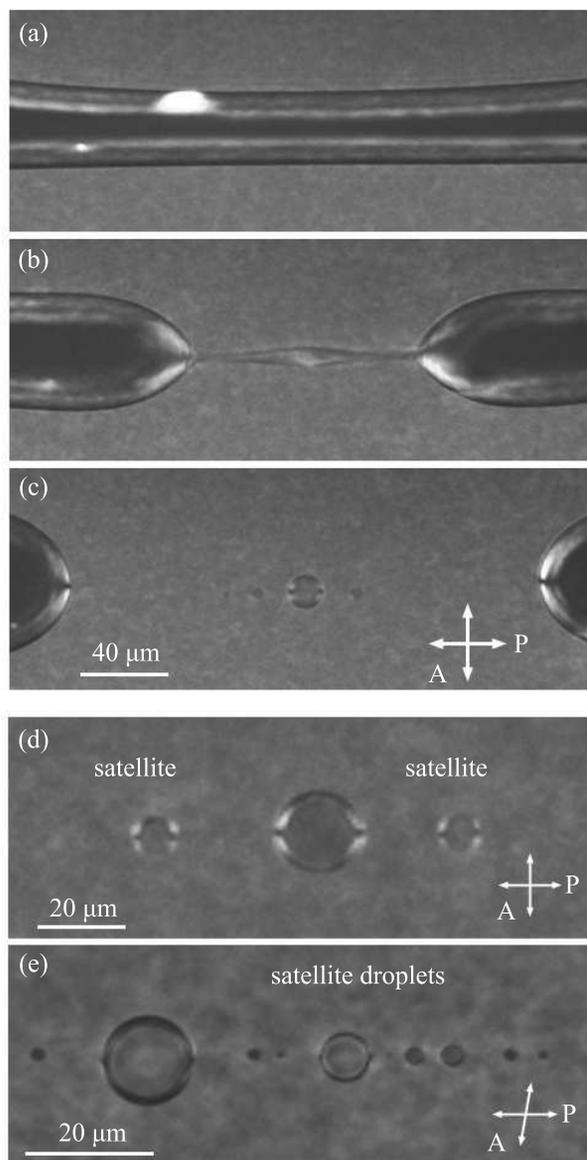


Рис. 4. (Цветной онлайн) Этапы трансформации плоски изотропной фазы (а)–(с): (а) – узкая прослойка, (б) – мостик неоднородной толщины перед разрывом, (с) – капли после каскада разрывов. Поляризатор и анализатор скрещены, ориентация поляризатора параллельна директору нематика вдали от участков изотропной фазы. Кадры (б) и (с) сняты через 15.5 с и 16.04 с после кадра (а). На кадре (с) видны дефекты на границах изотропных областей. На (д), (е) показаны результаты разрывов с более крупными по сравнению с фото (с) центральной каплей и спутными каплями. (е) – Может происходить каскад разрывов с образованием большого числа спутных капель

ей поля молекулярного упорядочения должны существовать топологические дефекты с суммарным топологическим зарядом +2. Это могут быть четы-

ре дефекта с топологическими зарядами $S = +1/2$ каждый (рис. 5а) или два топологических дефекта с

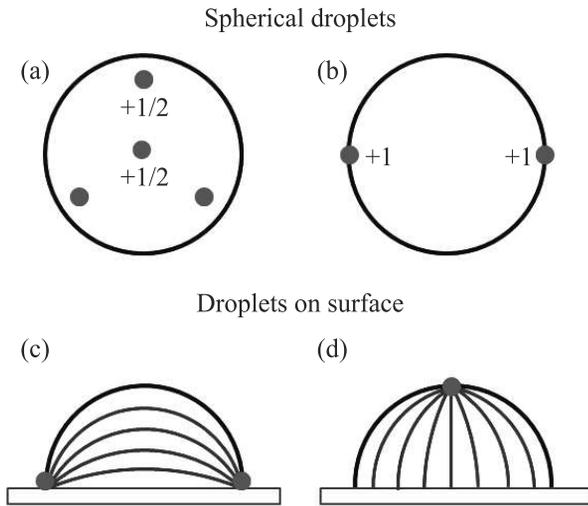


Рис. 5. (Цветной онлайн) Схематическое изображение сферических капель в нематическом жидком кристалле (а), (b) и полусферических капель на плоской поверхности (с), (d). На поверхности сферических капель расположены четыре топологических дефекта с зарядами $S = +1/2$ в вершинах тетраэдра (а) или два топологических дефекта с зарядами $S = +1$ на полюсах капли (b). (с) – Два дефекта у полусферической капли на плоской поверхности. Каждый дефект соответствует половине дефекта $S = +1$; планарные граничные условия на плоской поверхности. (d) – Дефект $S = +1$ у полусферической капли при гомеотропных граничных условиях на плоской поверхности. Синими линиями показана ориентация директора на поверхности капель

зарядами $S = +1$ (рис. 5b) [27]. То же справедливо для поля молекулярного упорядочения на поверхности шара с планарными граничными условиями. В случае, когда капли находятся на поверхности, могут существовать два дефекта, представляющие собой половину дефектов с зарядом $S = +1$ каждый (рис. 5с, планарные граничные условия на плоской поверхности) или один дефект с зарядом $S = +1$ (рис. 5d, гомеотропные граничные условия на плоской поверхности). На границе нематик–изотропная жидкость в E7 реализуются конические граничные условия [28, 29]: директор ориентируется под углом порядка 35° к границе раздела. В нашем случае наблюдаются два топологических дефекта на полюсах капель. Проекция директора на границу раздела соответствуют топологическому дефекту $S = +1$ для сферической капли и половине дефекта $S = +1$ для полусферической капли на плоской поверхности. В нашем эксперименте разрывы и образование дефек-

тов происходят последовательно в узких частях продолговатых капель. Дефекты в большой капле образовались в местах, которые были широкими при первичных разрывах. Топологические дефекты существуют в центральной и в сателлитных каплях, например, в каплях на рис. 4d, e. Таким образом, последовательно (каскадно) образуются не только капли, но и топологические дефекты.

Аналитические расчеты и численное моделирование (молекулярная динамика) [26] показывают, что в случае жидкости в воздухе или в другой жидкости при каскаде уменьшение размера сателлитных капель может приводить к образованию нанокластеров, кластеров из небольшого числа атомов или молекул. То же самое справедливо для нематика в воздухе или в другой жидкости. Однако мы изучаем другую систему, канал изотропной жидкости между областями нематика. Размер сателлитных капель не может быть меньше корреляционной длины ориентационного поверхностного упорядочения нематика ξ (при слабом фазовом переходе изотропная жидкость–нематик эта величина типично порядка десятка нанометров). Этот масштаб является естественным пределом для размера изотропных капель при каскаде с образованием сателлитных капель. Таким образом, мы приходим к заключению, что для нашей системы естественный минимальный размер сателлитных капель порядка нескольких десятков нанометров. Можно оценить также размер капель, в которых образуются топологические дефекты [22]. Энергия, связанная со сцеплением директора на границе капель $U_{\text{anch}}R^2$, упругая энергия порядка KR (где U_{anch} – энергия сцепления, K – модуль Франка, а R – характерный размер). Для существования топологических дефектов упругая энергия должна быть меньше поверхностной энергии. Полагая $K \sim 10^{-6}$ эрг/см, $U_{\text{anch}} \sim 10^{-2}$ эрг/см² [22, 30], критический размер капель $R \gtrsim 1$ мкм [22], что согласуется с нашими наблюдениями. Таким образом, при каскаде вначале должны перестать образовываться топологические дефекты на поверхности капель, а затем и сателлитные капли.

Перейдем теперь к описанию динамики утоньшения жидкого перешейка между областями нематика. Результаты представлены на рис. 6, где приведена временная зависимость ширины перешейка (в центре, по бокам и при образовании центральной капли). Полые кружки на рис. 6а – минимальная ширина прослойки w_{min} в центре и в двух локальных минимумах мостика вблизи его концов на конечном этапе разрыва (кружки с крестиками). Сплошными кружками показана ширина мостика в центре w_{max} ,

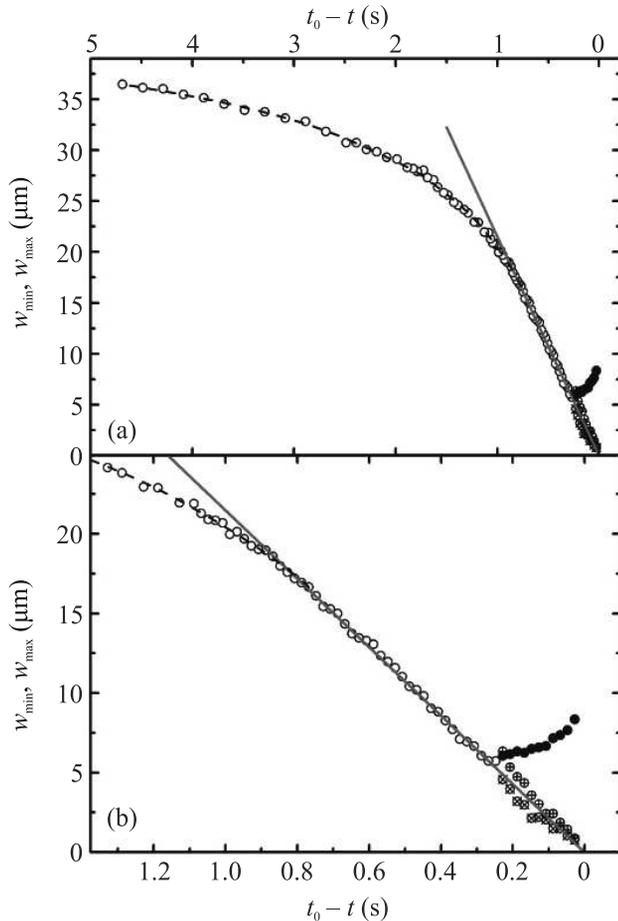


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость минимальной ширины мостика w_{\min} (полые и крестообразные символы) и максимальной ширины w_{\max} при образовании капли (сплошные символы) от времени разрыва мостика. Полые и сплошные символы соответствуют ширине в центре мостика, крестики – ширины на двух сторонах от центра на конечной стадии утоньшения. (b) – Данные в увеличенном масштабе. $h = 40$ мкм

когда его ширина начинает увеличиваться с последующим образованием капли. На рисунке 6b приведены данные в увеличенном масштабе. Величины w_{\min} в двух локальных минимумах несколько отличаются (кружки с крестиками) из-за некоторой асимметрии формы модулированного мостика. Временная зависимость минимального радиуса r_{\min} струи или мостика между каплями различна в случаях, когда доминируют инерция или вязкость [1, 2]. В обоих случаях перешеек разрывается за конечное время. В инерционном режиме (число Онезорге мало) из соотношения подобия следует $r_{\min} = A_I \left(\frac{\gamma}{\rho}\right)^{1/3} (t_b - t)^{2/3}$, где t_b – момент разрыва, A_I – безразмерный коэффициент, $A_I \approx 0.7$ [1]. Величина коэффициента A_I ,

полученная в численных расчетах, порядка 0.5–0.7 [2, 6, 31]. В случае, когда доминирует вязкость (число Онезорге большое), степенная зависимость линейная $r_{\min} = A\gamma/\mu(t_b - t)$ [32, 33]. Эксперименты подтвердили линейную зависимость при разрыве [34, 35]. Для случая равенства вязкости внутренней и внешней жидкости $A \approx 0.034$ [17, 24, 36]. Используя для A эту величину, из наших данных (рис. 6) следует, что капиллярная скорость $V_C \approx 3.2 \cdot 10^{-4}$ м/с. Капиллярную скорость можно оценить из величин поверхностного натяжения и вязкости [37–39]. Такой подход дает $V_C \approx 5 \cdot 10^{-4}$ м/с. Учитывая, что вязкость жидкого кристалла анизотропна (в пренебрежении сжимаемостью жидкого кристалла имеются три различных коэффициента вязкости), и что использованная теория не учитывает ориентирующего действия поверхностей ячейки, можно считать согласие величин приемлемым. Отметим, что аналогичные явления можно ожидать в тонких пленках [40], сложных жидкокристаллических структурах [41] и полимерах [18, 42].

Заключение. Таким образом, нами исследован разрыв тонких изотропных прослоек жидкости между областями нематического жидкого кристалла. Прослойки формировались в двухфазной области при переходе изотропной жидкости в нематик. В работе обнаружено образование топологических дефектов на границе раздела между двумя фазами и вблизи поверхности сателлитных капель, образующихся при каскадном разрыве прослоек. Изучена динамика, предшествующая разрыву, связанная с нестабильностью формы перешейка.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант # 23-12-00200.

1. J. Eggers, Rev. Mod. Phys. **69**, 865 (1997).
2. J. Eggers and E. Villermaux, Rep. Prog. Phys. **71**, 036601 (2008).
3. W. S. Rayleigh, Proc. London Math. Soc. **4**, 10 (1878).
4. N. Bohr, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. **209**, 281 (1909).
5. J. Plateau, *Statique Expérimentale et Théorique des Liquides Soumis aux Seules Forces Moléculaires*, Gautethier-Villars, Paris (1873).
6. Y. Lee and J. E. Sprittles, J. Fluid Mech. **797**, 29 (2016).
7. H. A. Stone, B. J. Bentley, and L. G. Lead, J. Fluid Mech. **173**, 131 (1986).
8. B. M. Tjahjadi, H. A. Stone, and J. M. Ottino, J. Fluid Mech. **243**, 297 (1992).
9. X. Zhang, R. S. Padgett, and O. A. Basaran, J. Fluid Mech. **329**, 207 (1996).
10. J. C. Burton, J. E. Rutledge, and P. Taborek, Phys. Rev. Lett. **92**, 244505 (2004).

11. J. C. Burton and P. Taborek, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 224502 (2007).
12. E. Alvarez-Lacalle, J. Casademunt, and J. Eggers, *Phys. Rev. E* **80**, 056306 (2009).
13. A. A. Castrejon-Pita, J. R. Castrejon-Pita, and I. M. Hutchings, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 074506 (2012).
14. D. Tiwari, L. Mercury, M. Dijkstra, H. Chaudhary, and J. F. Hernández-Sánchez, *Phys. Rev. Fluids* **3**, 124202 (2018).
15. H. Wee, B. W. Wagoner, P. M. Kamat, and O. A. Basaran, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 204501 (2020).
16. P. Bazazi, H. A. Stone, and S. H. Hejazi, *Phys. Rev. Lett.* **130**, 034001 (2023).
17. J. R. Lister and H. A. Stone, *Phys. Fluids* **10**, 2758 (1998).
18. A. B. Bazilevskii and A. N. Rozhkov, *Fluid Dynamics* **50**, 800 (2015).
19. A. Deblais, M. A. Herrada, I. Hauner, K. P. Velikov, T. van Roon, H. Kellay, J. Eggers, and D. Bonn, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 254501 (2018).
20. N. B. Speirs, K. R. Langley, P. Taborek, and S. T. Thoroddsen, *Phys. Rev. Fluids* **5**, 044001 (2020).
21. П. Ж. де Жен, *Физика жидких кристаллов*, пер. с англ., Мир, М. (1978), 400 с.
22. М. Клеман, О. Д. Лаврентович, *Основы физики частично упорядоченных сред*, пер. с англ., ФИЗМАТЛИТ, М. (2007), 680 с.
23. P. Oswald and P. Pieranski, *Nematic and Cholesteric Liquid Crystals: Concepts and Physical Properties Illustrated by Experiments*, Taylor and Francis, Boca Raton (2005).
24. I. Cohen, M. P. Brenner, J. Eggers, and S. R. Nagel, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1147 (1999).
25. J. Eggers and Z. Angew, *Math. Mech.* **85**(6), 400 (2005).
26. P. V. Dolganov, A. S. Zverev, K. D. Baklanova, and V. K. Dolganov, *Phys. Rev. E* **104**, 014702 (2021).
27. T. C. Lubensky and J. Prost, *J. Phys. II France* **2**, 371 (1992).
28. Y.-K. Kim, S. V. Shiyonovskii, and O. D. Lavrentovich, *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 404202 (2013).
29. P. V. Dolganov and N. A. Spiridenko, *Liq. Cryst.* **49**, 1933 (2022).
30. S. Faetti, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **179**, 217 (1990).
31. Y.-J. Chen and P. H. Steen, *J. Fluid Mech.* **341**, 245 (1997).
32. D. T. Papageorgiou, *J. Fluid Mech.* **301**, 109 (1995).
33. D. T. Papageorgiou, *Phys. Fluids* **7**, 1529 (1995).
34. T. A. Kowalewski, *Fluid Dyn. Res.* **17**, 121 (1996).
35. G. H. McKinley and A. Tripathi, *J. Rheol.* **44**, 653 (2000).
36. J. Eggers, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3458 (1993).
37. P. Oswald and G. Poy, *Phys. Rev. E* **92**, 062512 (2015).
38. H. Wang, T. X. Wu, S. Ganza, J. R. Wu, and S.-T. Wu, *Liq. Cryst.* **33**, 91 (2006).
39. R. Basu, D. Kinnamon, N. Skaggs, and J. Womack, *J. Appl. Phys.* **119**, 185107 (2016).
40. П. В. Долганов, В. К. Долганов, Е. И. Кац, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 236 (2022).
41. К. Д. Бакланова, В. К. Долганов, Е. И. Кац, П. В. Долганов, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 537 (2023).
42. A. V. Subbotin and A. N. Semenov, *Macromolecules* **55**, 2096 (2022).

Регистрация излучения, вызванного движением джозефсоновских вихрей в монокристалле $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_{6+\delta}$ в высоких магнитных полях, непосредственно внутри образца

С. И. Веденеев¹⁾

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

Поступила в редакцию 31 мая 2023 г.

После переработки 16 июня 2023 г.

Принята к публикации 16 июня 2023 г.

Образец высокотемпературного сверхпроводника с множеством внутренних джозефсоновских переходов, образованных атомными слоями, представляет собой нелинейную систему с уникальными динамическими свойствами. Внешнее магнитное поле проникает в образец в виде джозефсоновских вихрей, которые при движении генерируют излучение. Показано, что обнаружить это излучение в монокристалле $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_{6+\delta}$ ($\text{Bi}2201$) можно с помощью джозефсоновского перехода на микротрещине (break junction) непосредственно внутри самого монокристалла.

DOI: 10.31857/S1234567823140100, EDN: gznzgb

Настоящая работа является продолжением исследований динамики джозефсоновской вихревой решетки в сверхпроводящем монокристалле в однослойном высокотемпературном сверхпроводнике $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_{6+\delta}$ ($\text{Bi}2201$) в высоких магнитных полях [1, 2]. В работе [2] при измерении сопротивления образца с током перпендикулярным сверхпроводящим слоям (вдоль оси c) в магнитном поле, направленном параллельно слоям (ab плоскостям), наблюдались периодические осцилляции сопротивления течению потока (СТП) джозефсоновских вихрей. (Josephson-vortex flow resistance). В настоящее время хорошо установлено, что образец высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) с множеством внутренних джозефсоновских переходов между сверхпроводящими слоями представляют собой нелинейную систему с уникальными динамическими свойствами [3]. Магнитное поле создает внутри образца ВТСП решетку джозефсоновских вихрей, которая движется под действием тока больше критического I_c и при ее согласовании с одним из размеров структуры возникают осцилляции СТП джозефсоновских вихрей [4, 5]. В работе [2] были также обнаружены и осцилляции падения напряжения на образце вдоль оси c , индуцированного движением решетки джозефсоновских вихрей в магнитном поле, даже при отсутствии тока вдоль оси c . Совпадение особенностей осцилляций на зависимостях от

магнитного поля сопротивления и напряжения свидетельствовало об одинаковой их природе.

В обычном джозефсоновском переходе в смешанном состоянии электрическое и магнитное поля являются периодическими функциями времени. Период осцилляций есть $T = \alpha/\beta$, где α – период вихревой решетки, а β – ее скорость. Частота осцилляций соответствует фундаментальному соотношению Джозефсона $\omega = 2\pi/T = (2e\bar{V})/\hbar$ и определяется средним значением напряжения на структуре \bar{V} . Здесь \hbar есть постоянная Планка, а e – заряд электрона [6].

Следует особо подчеркнуть, что джозефсоновские вихри в образце ВТСП при движении генерируют электромагнитное поле, которое частично трансформируется в излучение. Частота излучения определяется джозефсоновской частотой, зависящей от приложенного напряжения и постоянного магнитного поля [7–9]. В частности, сам образец ведет себя как трехмерный внутренний резонатор электромагнитных волн, который связывает переменные джозефсоновские токи, генерируемые в каждом переходе. В резонансе джозефсоновские осцилляции возбуждают мощную, почти стоячую волну, которая синхронизирует осцилляции во всем образце [10]. Магнитное поле способствует сильному индуктивному взаимодействию между соседними джозефсоновскими переходами.

Здесь можно отметить, что хотя вопрос о существовании джозефсоновских вихрей и их динамики в образцах ВТСП в магнитном поле начал рассматриваться в начале 1970-х гг. [11], до сих пор он при-

¹⁾e-mail: vedeneevsi@lebedev.ru

влекает внимание исследователей (см., например, работы [8, 12–14]). И связано это в некоторой степени с возможностью получить когерентное ТГц излучение значительной мощности из внутренних джозефсоновских переходов в слоистом ВТСП (см., например, [15]).

Поскольку джозефсоновские вихри в образце при движении генерируют электромагнитное излучение в среде с падением напряжения на образце, связанное с течением потока вихрей, то естественно представляло интерес попытаться зарегистрировать это излучение непосредственно внутри образца. Кажется, что наиболее простой способ сделать это можно с помощью SIS (сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник) джозефсоновского туннельного перехода на микротрещине (break junction) внутри самого монокристалла. Имеется целый ряд статей, свидетельствующих о том, что break junction является одной из лучших туннельных систем (см., например, ссылки в работе [16]). Дополнительное подтверждение этому вместе с описанием используемой экспериментальной установки приведено в работе [17].

При изменении падения напряжения на образце с break junction с изменением магнитного поля, можно ожидать смешение двух излучений – джозефсоновского излучения самого break junction, частота которого зависит от магнитного поля, и излучения, вызванного движением вихрей. Тогда, разность фаз параметров порядка (мера корреляции сверхпроводящих пар) с обеих сторон микротрещины будет определяться соотношением Джозефсона с напряжением зависящем от времени $\partial\varphi/\partial t = 2eV(t)/\hbar$ [18].

Однако в данном случае туннельный ток в образце должен протекать вдоль ab плоскости. Попытка обнаружить периодические осцилляции СТП джозефсоновских вихрей в образце Bi2201 вдоль ab плоскости в параллельном магнитном поле не увенчалась успехом [1]. Сопротивление образца плавно возрастало с увеличением поля, поскольку увеличивалось лишь число вихрей. В тоже время, согласно выводам работы [19] в наклонных высоких магнитных полях при малых углах между направлением поля и ab плоскостью из-за притягательного взаимодействия джозефсоновских вихрей и вихрей Абрикосова в образце вдоль оси c образуется зигзагообразная вихревая структура. В этом случае можно ожидать серию максимумов плазменной частоты²⁾ и крити-

ческого тока Джозефсона при углах, для которых решетка вихрей Абрикосова находится в резонансе с решеткой джозефсоновских вихрей. Частота джозефсоновской плазменной волны при резонансе зависит от анизотропии и колеблется в широких пределах для различных ВТСП соединений от нескольких сотен ГГц до нескольких ТГц [20]. И действительно, в монокристалле Bi2201 при температурах ниже температуры сверхпроводящего перехода (T_c) были обнаружены периодические осцилляции СТП джозефсоновских вихрей в наклонных магнитных полях [1]. Максимальная амплитуда осцилляций достигалась при угле $\theta = 4^\circ$ между направлением поля и ab плоскостью образца.

Ниже представлены результаты экспериментов, которые были выполнены в наклонных высоких магнитных полях с образцом Bi2201 с указанной выше целью. Измерения проводились в Лаборатории Высоких Магнитных Полей в Гренобле (Франция). Процесс роста высококачественных монокристаллов Bi2201 и их характеристики были подробно описаны ранее [21]. При измерении сопротивления образца использовался стандартный четырех-контактный метод с симметричным расположением низкоомных контактов на обеих ab поверхностях образца (геометрия токовых и потенциальных контактов схематически показана на нижней вставке к рис. 1). В экспериментах ток через образец пропускался в ab плоскости. Всегда использовалась конфигурация с $B \perp J$. Методика измерения сопротивлений образцов в резистивном магните также описана в работе [21]. В экспериментальной установке образец мог вращаться *in situ* относительно направления магнитного поля с угловым разрешением лучше 0.1° . Ориентация $\theta = 0^\circ$ определялась по наименьшей величине сопротивления при фиксированной температуре. Размеры монокристалла ($l \times w \times d$) составляли приблизительно $3 \text{ мм} \times 0.3 \text{ мм} \times 2 \text{ мкм}$. T_c образца в нулевом поле, определенная точками 10 и 90% сверхпроводящего перехода, составляла 7.2–9.3 К. Образец с контактами закреплялся на гибкой подложке. В жидком гелии с помощью прецизионного механизма подложка изгибалась и в монокристалле образовывалась микротрещина по ранее сделанному надрезу. В результате создавался симметричный SIS break junction. В такой структуре туннельный ток течет вдоль ab плоскостей (см. [22] и ссылки там).

Так как результаты измерения сопротивления образца с break junction показали не совсем обычное поведение для сверхпроводника в магнитном поле, по-видимому, целесообразно сначала обсудить его характеристики в нулевом поле, которые при-

²⁾ Напряжение, обусловленное течением потока вихрей, создает осциллирующий ток из-за эффекта Джозефсона, который внутри слоистых сверхпроводников относительно больших размеров возбуждает джозефсоновские плазменные волны [7].

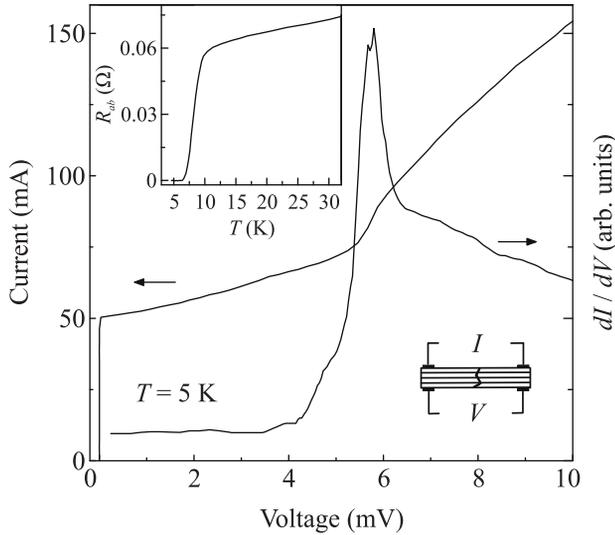


Рис. 1. $I-V$ характеристика и одновременно измеренная туннельная проводимость dI/dV как функция напряжения смещения V для break junction, созданного на основе монокристалла Bi2201, при $T = 5$ К. На верхней вставке приведена начальная часть температурной зависимости сопротивления этого образца в ab плоскости при $B = 0$ Тл до создания микротрещины. На нижней вставке схематически показана геометрия образца с микротрещиной, токовыми и потенциальными контактами

ведены на рис. 1. Видно, что вольтамперная ($I-V$) характеристика и дифференциальная проводимость $dI/dV(V)$ структуры являются типичными для SIS break junction на основе образца Bi2201 с резким пиком проводимости при напряжении около $2\Delta/e$, где 2Δ – сверхпроводящая энергетическая щель ($2\Delta/k_B T_c \simeq 7$), которая близка к значениям, измеренным ранее [23, 24]. На верхней вставке показана начальная часть температурной зависимости сопротивления этого образца в ab плоскости при $B = 0$ Тл до создания микротрещины.

Величину критического тока Джозефсона I_c при нулевом магнитном поле на $I-V$ характеристике следует обсудить подробнее. Как известно, произведение критического тока Джозефсона и сопротивления в нормальном состоянии R_N пропорционально сверхпроводящей энергетической щели ($I_c R_N \propto 2\Delta$) [25, 26]. Величина этого произведения важна, так как ею определяется рабочая частота джозефсоновских устройств перспективных в приложениях. Однако почти все джозефсоновские переходы, изготовленные на основе ВТСП, показывали значения $I_c R_N$ намного меньшие, чем предсказывала теория, независимо от использованного соединения [27]. Расхождение наблюдается и в настоящем случае, согласно

рис. 1 произведение $I_c R_N \approx 3$ мВ, что вдвое меньше величины $2\Delta/e$.

Эффект Джозефсона относится к “слабой сверхпроводимости” и естественно возникает вопрос о сохранении его свойств в высоких магнитных полях. В работе [17] было показано, что критический ток в образце с break junction (величиной $\simeq 150$ мкА) монотонно убывает с ростом магнитного поля. Например, в поле 9 Тл величина I_c уменьшалась лишь на 25 % своего первоначального значения. Причем зависимость I_c от магнитного поля хорошо аппроксимируются выражением $I_c \propto \ln(B)$. Кроме того, цитируемые измерения были проведены в полях, параллельных ab плоскости образца и при температурах, в которых верхнее критическое поле Bi2201 составляет 25–30 Тл [28].

При измерении сопротивления образца вдоль ab плоскостей в точно ориентированном параллельном магнитном поле оно лишь плавно возрастало с увеличением поля без каких-либо осцилляций. В то же время в наклонных магнитных полях при температурах ниже T_c с ростом магнитного поля наблюдались осцилляции сопротивления с максимальной амплитудой при угле $\theta = 4^\circ$ между направлением поля и ab плоскостью образца, как и ранее в работе [1].

Ввиду того, что целью настоящей работы было изучение влияния зависящего от времени падения напряжения на сопротивление образца с break junction, магнитосопротивление в экспериментах измерялось при разных скоростях развертки магнитного поля dB/dt . Неожиданно вид осцилляций и их период оказались зависимыми от скорости развертки. На рисунке 2 показана измеренная зависимость

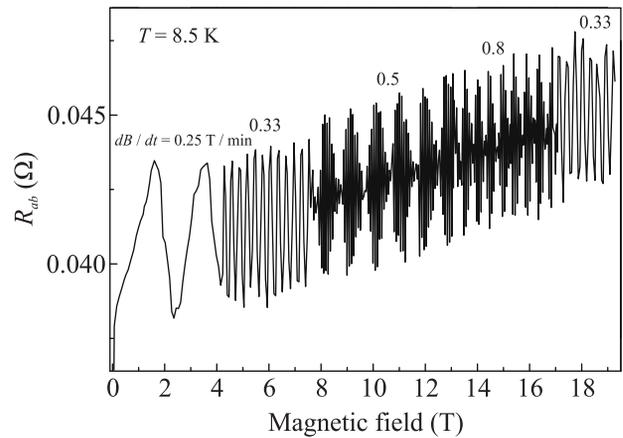


Рис. 2. Зависимость сопротивления течению потока джозефсоновских вихрей от магнитного поля при угле $\theta = 4^\circ$ между направлением поля и ab плоскостью образца с break junction при разных скоростях развертки магнитного поля (указаны в верхней части рисунка)

СТП джозефсоновских вихрей от магнитного поля при угле $\theta = 4^\circ$ между направлением поля и ab плоскостью образца, но при разных скоростях развертки магнитного поля. Как указано в верхней части рис. 2, во время записи этих данных скорость развертки менялась через определенные промежутки времени. Из рисунка 2 видно, что при $dB/dt = 0.25$ Тл/мин период осцилляций $\Delta B \approx 1.9$ Тл. Температура в этом случае была близка к величине, при которой сопротивление образца достигало приблизительно 50% от его значения в нормальном состоянии. Размеры исследуемых образцов в настоящей работе и работе [2] были очень близкими и скорости развертки магнитного поля были одинаковыми, поэтому периоды этих осцилляций в обеих работах совпали.

В экспериментах было измерено несколько зависимостей сопротивления от магнитного поля с постоянной, но каждый раз различной скоростью развертки и при разных температурах. Отдельные участки этих зависимостей с осцилляциями показаны в увеличенном масштабе на рис. 3. Справа для каждой кривой приведены скорости развертки магнитного поля, при которых они были записаны. Как видно из рис. 2 и 3, частота осцилляций сопротивления различная при разных скоростях развертки магнитного поля, а с увеличением ее скорости появляются и биения частот. Для более точного определения периода осцилляций B_p выполнялся фурье-анализ результатов данных измерений. В качестве примера, на рис. 4 (основная панель) представлена одна из экспериментальных зависимостей СТП джозефсоновских вихрей, измеренная при угле $\theta = 4^\circ$ и скорости развертки магнитного поля 0.5 Тл/мин, вместе с результатами фурье-анализа осцилляций (рис. 4, вставки а и б), $T = 7.5$ К. В полях до 6 Тл период осцилляций составляет приблизительно 0.09 Тл, которому соответствует только одна частота 11 Тл^{-1} (рис. 4, вставка а). При дальнейшем увеличении магнитного поля появляются биения двух близких частот $\omega_1 = 11.2 \text{ Тл}^{-1}$ и $\omega_2 = 12.2 \text{ Тл}^{-1}$ (рис. 4, вставка б), которым отвечают два периода B_p равные примерно 0.089 и 0.082 Тл. Резкие основные пики на вставках рис. 4 указывают на то, что период осцилляций достаточно постоянен в указанных диапазонах полей. Небольшие максимумы на вставке б, вблизи основных пиков относятся к гармоникам основных частот, так как осцилляции, по-видимому, не совсем синусоидальные.

При низких температурах до 7 К и при разных скоростях развертки магнитного поля наблюдались только простые осцилляции с разными периодами, но без каких-либо биений. При температурах выше

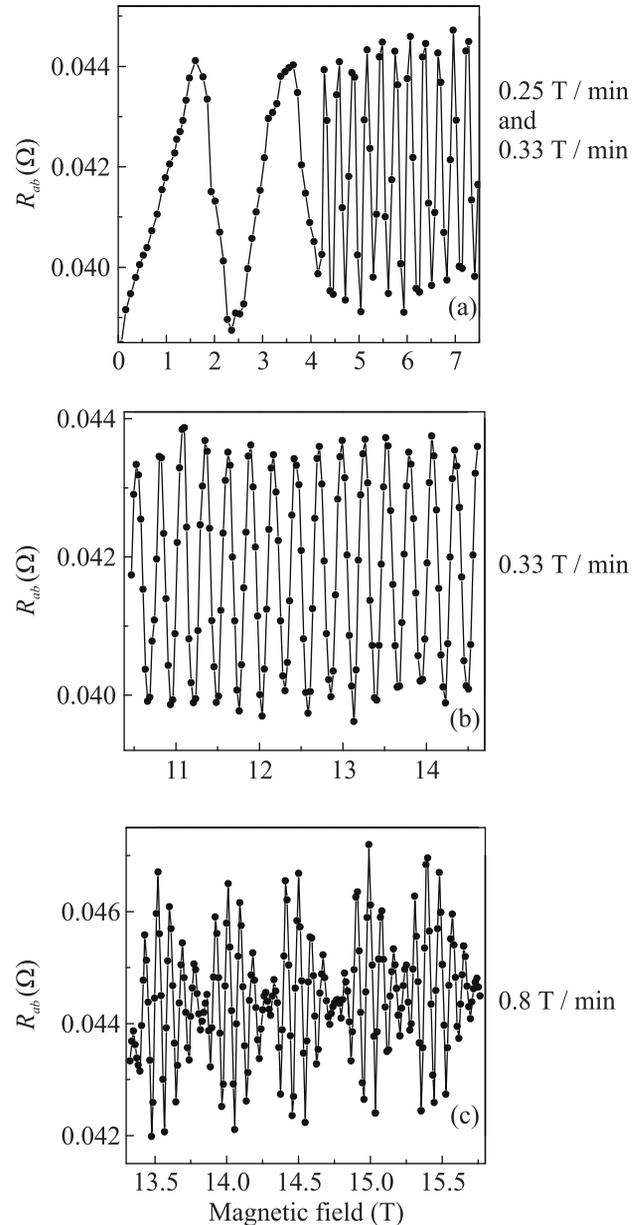


Рис. 3. Увеличенные области отдельных участков осцилляций, измеренных при указанных справа скоростях развертки магнитного поля. $T = 8.5$ К

8 К на зависимостях сопротивления от магнитного поля были одни биения. Их периоды, например, при скоростях развертки 0.5 и 0.8 Тл/мин составляли 1 и 0.5 Тл, соответственно (рис. 2). (Из-за шумов в начальных областях спектров на вставках к рис. 4 не удалось обнаружить малые частоты, соответствующие этим периодам.) Наконец, периоды простых осцилляций и их биений не зависели от температуры. Следует подчеркнуть, что после хранения образца в жидком гелии в течение суток сопротивление break

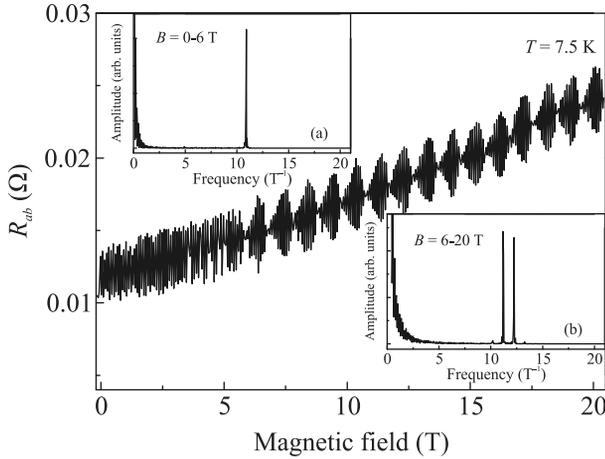


Рис. 4. Одна из зависимостей сопротивления течению потока джозефсоновских вихрей от магнитного поля, измеренная при угле $\theta = 4^\circ$ между направлением поля и ab плоскостью образца с break junction со скоростью развертки магнитного поля 0.5 Тл/мин. На вставках а и б показаны спектральные плотности мощности для осцилляций в начальной и основной частях сопротивления, соответственно, $T = 7.5$ К

junction незначительно изменилось, но все осцилляции и их периоды сохранились.

На рисунке 5 приведены периоды осцилляций сопротивления B_p , измеренные при шести скоростях развертки магнитного поля без учета периодов осцилляций внутри биений. Несмотря на разброс данных, можно полагать, что зависимость периода осцилляций СТП джозефсоновских вихрей линейная. Тем самым эксперименты показали, что период осцилляций зависит как от величины, так и от скорости развертки магнитного поля.

Для объяснения полученных результатов следует заметить, что ab вольт-амперные характеристики монокристаллов Вi2201 в параллельных магнитных полях ниже резистивного верхнего критического магнитного поля и для токов выше I_c подчиняются степенному закону с плавным изменением показателя степени с ростом магнитного поля [1]. Например, при токе 5 мА в ab плоскости образца, аналогичного исследованному в настоящих экспериментах, с увеличением магнитного поля до 20 Тл падение напряжения на нем увеличивалось от 0 до 2 мВ. Перестроив $I-V$ характеристику из рис. 1 в $R_{ab}(V)$ зависимость, можно найти из данных на рис. 4, что падение напряжения на образце, например, в поле 10 Тл составляет 490 мкВ. Тогда используя соотношение Джозефсона $\omega = 2eV/\hbar$ [6], нетрудно оценить частоту излучения, вызванного движением джозефсоновских вихрей, и которое регистрирует break junction при указанном

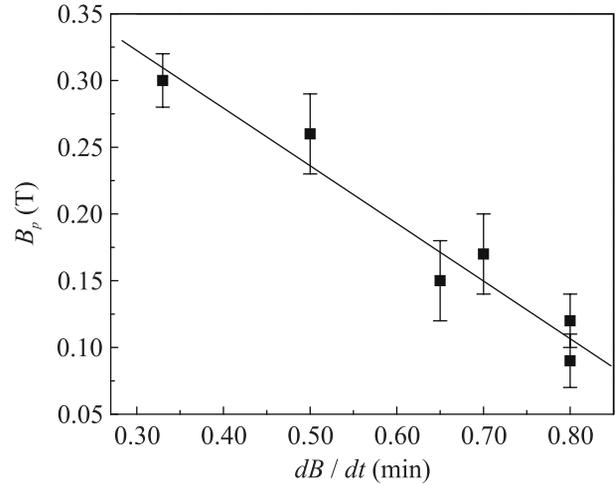


Рис. 5. Периоды осцилляций сопротивления B_p , измеренные при шести скоростях развертки магнитного поля (без учета периодов осцилляций внутри биений)

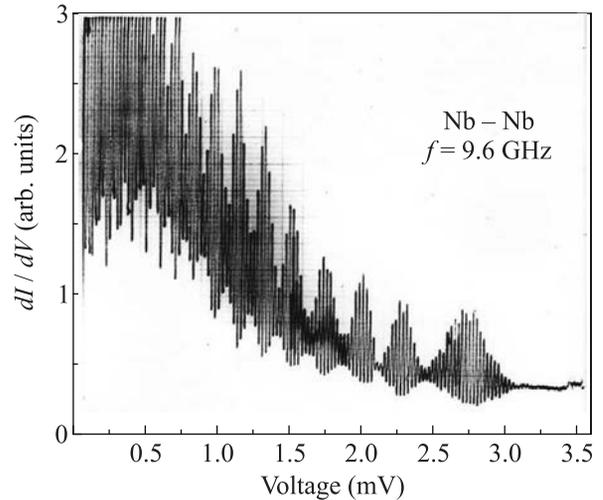


Рис. 6. Туннельная проводимость dI/dV как функция напряжения смещения V для обычного джозефсоновского перехода с осцилляциями, индуцированными внешним СВЧ излучением с частотой 9.6 ГГц. Период осцилляций составляет ≈ 20 мкВ [32]

напряжении. Она должна равняться приблизительно 0.43 ТГц. Это частота попадает в предполагаемую область частот излучений различными образцами ВТСП (см. [29] и ссылки там). Изменение периода осцилляций СТП джозефсоновских вихрей с изменением скорости развертки магнитного поля, скорее всего, связано как с изменением периода вихревой решетки и ее скорости, так и с изменением самой решетки (см. [30, 31] и ссылки там). Чтобы убедиться в том, что рис. 2–4 действительно отражают смещение в break junction частоты джозефсоновского излу-

чения с частотой излучения, вызванного движением вихрей, на рис. 6 в качестве примера показан результат регистрации обычным джозефсоновским контактом внешнего СВЧ излучения с частотой 9.6 ГГц [32]. Как и на рис. 2–4, настоящей работы, на рис. 6 видны и простые осцилляции и их биения.

В итоге, периодические осцилляции СТП джозефсоновских вихрей образца Bi2201 связаны с движением этих вихрей в магнитном поле. При движении в образце вихри генерирует электромагнитное поле, которое частично превращается в излучение. Показана возможность регистрации этого излучения непосредственно внутри образца с помощью смешения двух излучений – излучения джозефсоновского break junction, частота которого зависит от магнитного поля и напряжения, и излучения, вызванного движущимися джозефсоновскими вихрями.

1. S. I. Vedeneev and D. K. Maude, Phys. Rev. B **77**, 064511 (2008).
2. С. И. Веденеев, Письма в ЖЭТФ **109**, 25 (2019).
3. R. Kleiner, F. Steinmeyer, G. Kunkel, and P. Muller, Phys. Rev. Lett. **68**, 2394 (1992).
4. S. Ooi, T. Mochiku, and K. Hirata, Phys. Rev. Lett. **89**, 247002 (2002).
5. I. Kakeya, Y. Kubo, M. Kohri, M. Iwase, T. Yamamoto, and K. Kadowaki, Phys. Rev. B **79**, 212503 (2009).
6. И. О. Кулик, И. К. Янсон, *Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах*, Наука, М. (1970).
7. L. N. Bulaevskii and A. E. Koshelev, Phys. Rev. Lett. **97**, 267001 (2006).
8. L. Ozyuzer, A. E. Koshelev, C. Kurter, N. Gopalsami, Q. Li, M. Tachiki, K. Kadowaki, T. Yamamoto, H. Minami, H. Yamaguchi, T. Tachiki, K. E. Gray, W. K. Kwok, and U. Welp, Science **318**, 1291 (2007).
9. K. Delfanazari, H. Asai, M. Tsujimoto, T. Kashiwagi, T. Kitamura, T. Yamamoto, M. Sawamura, K. Ishida, C. Watanabe, S. Sekimoto, H. Minami, M. Tachiki, R. A. Klemm, T. Hattori, and K. Kadowaki, Opt. Express **21**, 2171 (2013).
10. A. E. Koshelev and L. N. Bulaevskii, Phys. Rev. B **77**, 014530 (2008).
11. Л. Н. Булаевский, ЖЭТФ **64**, 2241 (1973).
12. T. R. Naibert, H. Polshyn, R. Garrido-Menacho, M. Durkin, B. Wolin, V. Chua, I. Mondragon-Shem, T. Hughes, N. Mason, and R. Budakian, Phys. Rev. B **103**, 224526 (2021).
13. U. E. Khodaeva and M. A. Skvortsov, Phys. Rev. B **105**, 134504 (2022).
14. V. Plastovets and A. S. Mel'nikov, Phys. Rev. B **105**, 094516 (2022).
15. K. Katsumi, M. Nishida, S. Kaiser, S. Miyasaka, S. Tajima, and R. Shimano, Phys. Rev. B **107**, 214506 (2023).
16. С. И. Веденеев, УФН **191**, 937 (2021).
17. S. I. Vedeneev, B. A. Piot, and D. K. Maude, Phys. Rev. B **81**, 054501 (2010).
18. И. О. Кулик, Письма в ЖЭТФ **2**, 134 (1965).
19. L. N. Bulaevskii, M. Maley, H. Safar, and D. Dominguez, Phys. Rev. B **53**, 6634 (1996).
20. A. E. Koshelev, Phys. Rev. B **76**, 054525 (2007).
21. S. I. Vedeneev and D. K. Maude, Phys. Rev. B **70**, 184524 (2004).
22. S. I. Vedeneev and D. K. Maude, Phys. Rev. B **72**, 144519 (2005).
23. J. M. Harris, P. J. White, Z.-X. Shen, H. Ikeda, R. Yoshizaki, H. Eisaki, S. Uchida, W. D. Si, J. W. Xiong, Z.-X. Zhao, and D. S. Dessau, Phys. Rev. Lett. **79**, 143 (1997).
24. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jansen, and P. Wyder, Physica B **300**, 38 (2001).
25. V. Ambegaokar and A. Baratoff, Phys. Rev. Lett. **11**, 104 (1963).
26. И. О. Кулик, А. Н. Омелянчук, Письма в ЖЭТФ **21**, 216 (1975).
27. T. Yokoyama, Y. Sawa, Y. Tanaka, A. A. Golubov, A. Maeda, and A. Fujimaki, Phys. Rev. B **76**, 052508 (2007).
28. S. I. Vedeneev, C. Proust, V. P. Mineev, M. Nardone, and G. L. J. A. Rikken, Phys. Rev. B **73**, 014528 (2006).
29. M. Tsujimoto, T. Yamamoto, K. Delfanazari, R. Nakayama, T. Kitamura, M. Sawamura, T. Kashiwagi, H. Minami, M. Tachiki, K. Kadowaki, and R. A. Klemm, Phys. Rev. Lett. **108**, 107006 (2012).
30. V. K. Vlasko-Vlasov, A. Glatz, A. E. Koshelev, and W.-K. Kwok, Phys. Rev. B **91**, 224505 (2015).
31. A. E. Koshelev, Phys. Rev. B **62**, R3616 (2000).
32. С. И. Веденеев, Диссертация док. физ.-матем. наук, ФИАН, М. (1982).

р_q-дуальность: набор примеров

З. Закирова^{+*1)}, В. Лунев⁺¹⁾, Н. Белобородов⁺¹⁾

⁺Казанский государственный энергетический университет, 420066 Казань, Россия

^{*}Институт проблем передачи информации, 127994 Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 июня 2023 г.

После переработки 22 июня 2023 г.

Принята к публикации 22 июня 2023 г.

Мы детально рассматриваем ряд двухчастичных примеров р_q-дуальности Рудженаарса и строим дуальные гамильтонианы. Специальный интерес представляет модель синус-Гордона.

DOI: 10.31857/S1234567823140112, EDN: gzqwce

1. Введение. Понятие р_q-дуальности было введено С. Рудженаарсом [1] при описании многочастичных систем семейства Калоджеро–Рудженаарса. Позднее эта дуальность применялась в теории Зайберга–Виттена для построения дважды эллиптических систем, описывающих низкоэнергетический предел шестимерной суперсимметричной калибровочной теории, содержащей материю в присоединенном представлении [2, 3]. На самом деле, дважды эллиптические системы были построены только в простейшем случае систем с одной степенью свободы, а вопрос построения N -частичных систем до сих пор остается открытым.

Позднее в [4] был сформулирован более общий подход к р_q-дуальности, который позволяет работать с ней как с любой интегрируемой N -частичной системой. Однако до настоящего момента имеется только очень ограниченный набор примеров дуальных систем. В этом письме мы расширим этот набор. Начав в качестве разминки с хорошо известного примера тригонометрической системы Рудженаарса, где дуальность, собственно, и была впервые обнаружена С. Рудженаарсом [1] (хотя и совершенно другим способом), мы далее изучим случай двухчастичной цепочки Тоды, как неперiodической (система Лиувилля), так и периодической (система синус-Гордона). Этот последний случай особо интересен, поскольку мы до сих пор не знаем гамильтонианы систем, дуальных эллиптическим системам Калоджеро и Рудженаарса, а периодическая система Тоды обладает скрытой эллиптичностью и получается из эллиптической системы Калоджеро в иноземцевском пределе [5]. Эта скрытая эллиптичность проявляет себя

в дуальном тодовском гамильтониане, который задается эллиптической функцией Якоби, причем эллиптический модуль зависит от координат системы. Поскольку периодическая система Тоды проще, чем эллиптическая модель Калоджеро, вероятно, в этом случае будет проще получить дуальные гамильтонианы и с числом частиц $N > 2$.

Подчеркнем, что построение N -частичных дважды эллиптических систем является совершенно нетривиальной задачей. Конечно, можно построить систему, в которой как импульсы, так и координаты будут лежать на торе, однако дважды эллиптическая система, по определению [2], самодуальна – и самодуальность является тем самым крайне нетривиальным свойством. Как пример, можно указать двухчастичную систему, предложенную Х. Браденом и Т. Холловудом [6], которая была позднее обобщена на N -частичную систему П. Коротеевым и Ш. Шакировым [7]. Эта система эллиптична как по импульсам, так и по координатам, но не самодуальна. Более того, как было показано в [8], эта система (на квантовом уровне) не отвечает правильному преобразованию дуальности даже в случае, когда одна из эллиптичностей вырождена: для получения правильного дуального гамильтониана требуется проделать некоторое дополнительное преобразование. Это не должно вызывать удивление – гамильтониан даже двухчастичной самодуальной системы [2] гораздо сложнее гамильтониана, предложенного в [6, 7].

В данной заметке мы рассматриваем только случай классической дуальности, хотя квантовая р_q-дуальность даже естественнее, и, возможно, лучше начинать с квантового случая, переходя к классической р_q-дуальности в квазиклассическом пределе. Тем не менее, классический случай сам по себе также представляет ценность.

¹⁾e-mail: zolya_zakirova@mail.ru;
vladisavlunev138@gmail.com; nichegoloch567@gmail.com

2. Преобразование дуальности в системах с одной степенью свободы. Мы начнем с объяснения того, что такое р q -дуальность. Дуальность, по определению, это отображение из набора гамильтонианов $H_i(p, q|g)$, где g – константа связи, в набор дуальных гамильтонианов $H_i^D(p, q|g)$ заданный следующим антиканоническим преобразованием переменных $\{p_i, q_i\} \rightarrow \{P_i, Q_i\}$:

$$\begin{cases} H_i(p_i, q_i|g) = H_i^{(0)}(Q_i) \\ \sum_i dp_i \wedge dq_i = -\sum_i dP_i \wedge dQ_i \end{cases} \quad (1)$$

и мы рассматриваем интегрируемую систему со свойством $H_i(p, q; 0) = H_i^{(0)}(p)$. Это определение означает, что гамильтонианы $H_i^{(0)}(Q_i)$ описывают свободную систему. В этом определении имеется произвол – например, можно добавить к P_i произвольные функции Q_i .

Тогда набор дуальных гамильтонианов определен как

$$H_i^D(P_i, Q_i|g) = H_i^{D,(0)}(q_i). \quad (2)$$

Не очень существенно, как выбрать $H_i^{D,(0)}$, поскольку функции гамильтонианов остаются гамильтонианами, однако их надо выбрать так, чтобы H_i^D были хорошо определенными (однозначными) функциями на симплектическом многообразии.

Если дуальные гамильтонианы могут быть выбраны совпадающими с первоначальными, система называется самодуальной. Требование антиканоничности преобразования $\{p_i, q_i\} \rightarrow \{P_i, Q_i\}$ возникает потому, что при $g = 0$ гамильтониан свободной системы $H_i^{(0)}(p_i)$ равен $H_i^{(0)}(Q_i)$, т.е. $p_i = Q_i$. Можно, конечно, определить новую координату каноническим преобразованием, переставив Q_i и P_i , но тогда система Рудженаарса перестает быть самодуальной.

В качестве простого примера рассмотрим гамильтониан (это называется рациональной моделью Калоджеро)

$$H(p, q; g) = \frac{p^2}{2} + \frac{g}{2q^2} \quad (3)$$

и

$$H_0(p) = \frac{p^2}{2}. \quad (4)$$

Введем теперь новые переменные P, Q такие, что

$$H(p, q; g) = H_0(Q). \quad (5)$$

Преобразование $(p, q) \rightarrow (P, Q)$, по определению, антиканоническое. Поэтому имеется два условия на

две новые переменные P и Q . На самом деле, антиканоническое преобразование определено неоднозначно – к P можно добавить произвольную функцию Q .

В этих новых переменных можно ввести новый свободный гамильтониан H_0^D , зависящий только от q , и определить H^D , называемый дуальным гамильтонианом:

$$H^D(P, Q; g) := H_0^D(q). \quad (6)$$

К примеру, для гамильтониана (3) и уравнения (5), антиканоническое преобразование с простейшим выбором переменной P дает

$$Q^2 = p^2 + \frac{g}{q^2}, P^2 = q^2 - \frac{g}{Q^2}.$$

Действительно, скобка Пуассона

$$\begin{aligned} \{P, Q\} &= \frac{\partial P}{\partial p} \cdot \frac{\partial Q}{\partial q} - \frac{\partial Q}{\partial p} \cdot \frac{\partial P}{\partial q} = \\ &= -\frac{g^2}{(p^2q^2 + g)^2} - \frac{p^2q^2q(2g + p^2q^2)}{(p^2q^2 + g)^2} = -1, \end{aligned} \quad (8)$$

как и должно быть для антиканонического преобразования. Выберем теперь $H_0^D(q) = \frac{q^2}{2}$ и заметим, что

$$H^D(P, Q) = \frac{P^2}{2} + \frac{g}{2Q^2} = H(P, Q). \quad (9)$$

Таким образом, у нас имеется самодуальный гамильтониан, и система самодуальна.

Простейший способ иметь дело с антиканоническим преобразованием – переписать его в виде

$$dP \wedge dQ = -dp \wedge dq. \quad (10)$$

Тогда из (5)

$$\frac{\partial H_0(Q)}{\partial Q} dQ = \frac{\partial H(p, q; g)}{\partial p} dp + \frac{\partial H(p, q; g)}{\partial q} dq \quad (11)$$

и из (6)

$$\frac{\partial H_0^D(q)}{\partial q} dq = \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial P} dP + \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial Q} dQ. \quad (12)$$

Умножая левую часть (11) на правую часть (12) и наоборот и используя, что $dQ \wedge dQ = dP \wedge dP = 0$, получим

$$\frac{\partial H_0(Q)}{\partial Q} \cdot \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial P} = \frac{\partial H_0^D(q)}{\partial q} \cdot \frac{\partial H(p, q; g)}{\partial p}. \quad (13)$$

Это уравнение вместе с (5) и (6) дает три уравнения на три неизвестных переменных P, Q и $H^D(P, Q; q)$. Однако любое решение этих уравнений допускает добавление произвольной функции Q к P .

3. Тригонометрическая система Рудженаарса. В качестве менее тривиального примера рассмотрим двухчастичную гиперболическую систему Рудженаарса. С этого момента мы работаем в системе центра масс с взаимодействующими гамильтонианами, зависящими только от разностей координат. Поэтому в двухчастичном случае можно выбрать $p = p_1 = -p_2$ и $q = q_1 - q_2$, и гамильтониан системы Рудженаарса принимает вид

$$H = \frac{\sinh(q + g)}{\sinh q} e^p + \frac{\sinh(q - g)}{\sinh q} e^{-p},$$

$$H_0^D(q) = 2 \cosh q. \quad (14)$$

В этом случае $H(p, q; 0) = H_0(p) = e^p + e^{-p}$, тогда $H_0(Q) = e^Q + e^{-Q} = 2 \cosh Q$. Из (5) получается

$$2 \cosh Q = \frac{\sinh(q + g)}{\sinh q} e^p + \frac{\sinh(q - g)}{\sinh q} e^{-p}.$$

Напишем уравнение (13), учтя $H^D(P, Q; g) = 2 \cosh q$:

$$\sinh Q \cdot \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial P} = \sinh q \cdot \frac{\partial H(p, q; g)}{\partial p}. \quad (15)$$

Заметим, что

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)^2 - H^2 = 4 \cdot \frac{\sinh(q + g) \sinh(q - g)}{\sinh^2 q}.$$

Тогда уравнение (15) принимает вид

$$\sinh Q \cdot \frac{\partial H^D}{\partial P} = \sqrt{H^2 \sinh^2 q - 4 \sinh(q + g) \sinh(q - g)}$$

с ветвью квадратного корня, выбранной подходящим образом.

Это уравнение после преобразований переписывается как интеграл

$$\int^{H^D} \frac{dz}{\sqrt{z^2 - k^2}} = P, \quad k^2 = 4 \cdot \frac{\sinh^2 Q - \sinh^2 g}{\sinh^2 Q}.$$

Производя интегрирование, находим

$$P = \ln |H^D + \sqrt{(H^D)^2 - k^2}|, \quad (16)$$

и можно добавлять произвольную функцию Q к P . Из (16) можно получить

$$2H^D = e^P + k^2 e^{-P}$$

и, переписывая k^2 как

$$k^2 = 4 \cdot \frac{\sinh(Q + g) \sinh(Q - g)}{\sinh^2 Q}$$

и делая сдвигку $P \rightarrow P + \ln \frac{2 \sinh(Q + g)}{\sinh Q}$, окончательно получаем

$$H^D = \frac{\sinh(Q + g)}{\sinh Q} e^P + \frac{\sinh(Q - g)}{\sinh Q} e^{-P}. \quad (17)$$

Таким образом, формулы (14) и (17) воспроизводят знаменитый результат С. Рудженаарса [1], что гиперболическая система Рудженаарса самодуальна.

4. Непериодическая цепочка Тоды. Рассмотрим теперь новый пример дуальных систем – непериодическую цепочку Тоды, которая в двухчастичном случае задается гамильтонианом

$$H(p, q; g) = \frac{p^2}{2} + ge^q, \quad H_0^D(q) = e^q. \quad (18)$$

Когда $g = 0$, гамильтониан свободной системы $H(p, q; 0) = H_0(p) = \frac{p^2}{2}$, т.е. $H_0(Q) = \frac{Q^2}{2}$. Тогда из (5)

$$Q^2 = p^2 + 2ge^q. \quad (19)$$

В соответствии с формулой (6), дуальный гамильтониан $H^D(P, Q; g) = e^q$, и из (13) получается

$$Q \cdot \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial P} = pe^q$$

или

$$Q \cdot \frac{\partial H^D}{\partial P} = H^D \cdot \sqrt{Q^2 - 2gH^D}$$

опять с подходящим выбором ветви корня.

Интегрируя это уравнение с подходящим образом подобранной функцией Q , получаем

$$P = \ln \frac{Q - \sqrt{Q^2 - 2gH^D}}{Q + \sqrt{Q^2 - 2gH^D}}. \quad (20)$$

Следовательно, дуальный гамильтониан

$$H^D = \frac{Q^2}{2g \cosh^2(P/2)}. \quad (21)$$

Переменная P в терминах переменных p, q :

$$P = \ln \frac{\sqrt{p^2 + 2ge^q} - p}{\sqrt{p^2 + 2ge^q} + p}. \quad (22)$$

Используя формулы (19), (22), можно проверить, что скобка Пуассона

$$\{P, Q\} = -\frac{2ge^q}{p^2 + 2ge^q} + \frac{gpe^q}{p^2 + 2ge^q} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{\sqrt{p^2 + 2ge^q} + p} - \frac{1}{\sqrt{p^2 + 2ge^q} - p} \right) =$$

$$= -\frac{2ge^q + p^2}{p^2 + 2ge^q} = -1.$$

5. Периодическая цепочка Тоды. Наконец, рассмотрим наиболее интересный пример периодической цепочки Тоды. Двухчастичный гамильтониан имеет вид

$$H(p, q; g) = \frac{p^2}{2} + g^2 \cosh^2 q, \quad H_0^D(q) = \cosh q. \quad (23)$$

Следовательно, $H(p, q; 0) = H_0(p) = \frac{p^2}{2}$, откуда $H_0(Q) = \frac{Q^2}{2}$ и из (5)

$$Q^2 = p^2 + 2g^2 \cosh^2 q. \quad (24)$$

Уравнение (13) имеет вид

$$Q \cdot \frac{\partial H^D(P, Q; g)}{\partial P} = p \sinh q$$

или

$$Q \cdot \frac{\partial H^D}{\partial P} = \sqrt{Q^2 - 2g^2(H^D)^2} \cdot \sqrt{(H^D)^2 - 1}.$$

Здесь $\cosh q = H^D$, и нужно быть аккуратным с двумя ветвями корней. Отсюда получается интеграл

$$\int^{H^D} \frac{dz}{\sqrt{Q^2 - 2g^2 z^2} \cdot \sqrt{z^2 - 1}} = \frac{P}{Q}.$$

Он может быть переписан в виде

$$\int^{H^D} \frac{dz}{\sqrt{1 - k^2 z^2} \cdot \sqrt{1 - z^2}} = iP, \quad k^2 = \frac{2g^2}{Q^2}.$$

После замены переменных $z = \sin t$ получается интеграл

$$\int_0^{\arcsin H^D} \frac{dt}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}} = iP,$$

который является эллиптическим интегралом, и мы фиксируем произвольную функцию Q , выбирая нижний предел интеграла. Теперь легко получить формулу для дуального гамильтониана H^D в виде функции Якоби $\operatorname{sn}(x|k)$, где k – эллиптический модуль [9]:

$$H^D = \operatorname{sn}\left(iP \left| \sqrt{2g}Q^{-1} \right.\right).$$

Удивительная черта этого дуального гамильтониана – появление эллиптической функции, несмотря на то, что гамильтониан Тоды (23) не содержит никакой эллиптичности. Более того, эллиптический модуль в H^D динамический, т.е. зависит от координаты. Причиной является то, что периодическая цепочка Тоды получается в иноземцевском пределе из эллиптической модели Калоджеро [5], и гамильтониан, дуальный эллиптической модели Калоджеро, также зависит от динамического эллиптического модуля [2].

Еще раз подчеркнем важность этого примера, поскольку он ухватывает основные черты эллиптической модели Калоджеро (дуальный гамильтониан является функцией Якоби с динамическим эллиптическим модулем [2]), но много проще. Это открывает возможность построения дуальных гамильтонианов, обладающих основными чертами эллиптического калоджеровского случая, с числом частиц $N > 2$.

Мы благодарны А. Мионову за ценные обсуждения.

Эта работа была поддержана Российским научным фондом (грант # 23-41-00049).

1. S. N. M. Ruijsenaars, *Comm. Math. Phys.* **115**, 127 (1988).
2. H. W. Braden, A. Marshakov, A. Mironov, and A. Morozov, *Nucl. Phys. B* **573**, 553 (2000); hep-th/9906240.
3. A. Mironov and A. Morozov, *Phys. Lett. B* **475**, 71 (2000); hep-th/9912088; hep-th/0001168.
4. A. Mironov and A. Morozov, *Phys. Lett. B* **524**, 217 (2002); hep-th/0107114.
5. V. Inozemtsev, *Comm. Math. Phys.* **121**, 629 (1989).
6. H. W. Braden and T. J. Hollowood, *JHEP* **0312**, 023 (2003); hep-th/0311024.
7. P. Koroteev and S. Shakirov, arXiv:1906.10354.
8. A. Mironov, A. Morozov, and Y. Zenkevich, *Eur. Phys. J. C* **81**, 461 (2021); arXiv:2103.02508.
9. H. Bateman and A. Erdelyi, *Higher transcendental functions*, MC Graw-Hill Book Company, Inc., London (1955), v. 3.

Резонансы для явно решаемой модели ультразвукового рассеяния мембраной клетки

И. Ю. Попов¹⁾, Т. С. Юрова¹⁾

Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 7 мая 2023 г.

После переработки 11 июня 2023 г.

Принята к публикации 13 июня 2023 г.

Мы изучаем резонансы при рассеянии акустических волн клеточной мембраной. В связи с тем, что мы имеем дело только с этим явлением, мы используем простейшую модель мембраны как потенциала, сосредоточенного на поверхности. Получена асимптотика функции Грина с особенностью на поверхности. Исследовано влияние кривизны поверхности на резонансы. Обсуждается применение полученного результата для объяснения избирательного разрушения мембран раковых клеток в ультразвуковом поле.

DOI: 10.31857/S1234567823140124, EDN: hacawb

1. Вступление. Это исследование мотивировано биофизическими проблемами, связанными со сравнением мембран нормальных и раковых клеток. Мембрана является важной разделительной структурой в эукариотических клетках. Хотя мембрана тонкая (7–8 мкм), она имеет сложную структуру, состоит из липидного бислоя, в состав которого входят белковые молекулы [1]. Мембрана играет защитную роль, разделяя внутреннюю часть клетки и окружающую среду, а также выполняет транспортную функцию. Существуют различные модели клеточных мембран (см., например, [1–6]). Одной из наиболее часто используемых модельных мембранных систем является мультислойная липосома [7]. Она состоит из множества концентрических слоев липидного двойного слоя, напоминающего в поперечном сечении луковицу. Мембранные модельные системы широко использовались для выявления свойств липидов в мембранах. В настоящей работе мы изучаем только один аспект проблемы: воздействие ультразвука на клеточную мембрану. Исследование было мотивировано экспериментальной работой [8], связанной с разрушением клеток акустическим полем. Было известно, что клеточная мембрана меняет свои свойства в ультразвуковом поле [9]. Авторы [8] выявили интересное явление, связанное с внедрением наночастиц в клетку. Они показали, что интенсивное ультразвуковое излучение приводит к разрушению раковых и нормальных клеток, в результате чего выживает около 65 % клеток обоих типов. С другой стороны, добавле-

ние наночастиц золота приводит к тому, что из нормальных клеток выжили 60 %, а из раковых - 30 %, т.е. мембраны раковых клеток разрушаются быстрее. Это открывает путь селективного разрушения раковых клеток. Для успешного технологического применения необходимо понять поведение клетки в акустическом поле. Однако на данный момент нет теоретического объяснения и математической модели наблюдаемых явлений. В этой статье мы представляем математическую основу модели. Начнем с известного факта, что раковая клетка имеет неровную границу в отличие от нормальной клетки, которая имеет гладкую границу. Если на клетку воздействовать ультразвуковым полем, то внедренные наночастицы играют роль точечных источников для акустического поля. Для выяснения их влияния следует исследовать функцию Грина (т.е. поле точечного источника) для задачи, точнее, асимптотику функции Грина вблизи точечного источника. Это тема нашей статьи. Нас интересуют только акустические явления. Именно поэтому мы рассматриваем простейшую модель клеточной мембраны – потенциал, сосредоточенный на поверхности. Точнее, мы имеем дело с оператором Лапласа, возмущенным потенциалом с носителем на поверхности. Такие операторы широко исследуются в последнее время [10–19]. Нас интересует влияние точечного источника, расположенного на поверхности, на рассеяние плоской волны. Точнее, вопрос: изменится ли ситуация, если кривизна поверхности в точке вблизи источника стала больше? Для ответа на вопрос найдем асимптотику функции Грина вблизи точки источника. Следующим шагом является исследование резонансов для задачи рассеяния. Мы изу-

¹⁾e-mail: popov1955@gmail.com;
tatiana.yurova@metalab.ifmo.ru

чаем влияние кривизны границы на положение резонансов на комплексной плоскости, влияющее на локальное усиление акустического поля.

2. Асимптотика функции Грина. Пусть Ω – ограниченная область, $\Omega = \{x : \Phi(x) < 0\}$, с гладкой границей $\Gamma \in C^\beta, \beta > 3$, $\Phi \in C^\beta$. Мы рассматриваем оператор Лапласа в $L_2(\mathbf{R}^3)$, возмущенный потенциалом, сосредоточенным на Γ (т.е. с полупрозрачной границей Ω). Таким образом, область определения оператора состоит из функций из пространства Соболева $W_2^2(\mathbf{R}^3)$, удовлетворяющих следующему граничному условию на Γ :

$$\begin{aligned} v|_{\Gamma_+} &= v|_{\Gamma_-}, \\ \frac{\partial v}{\partial n}\Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial v}{\partial n}\Big|_{\Gamma_-} &= \alpha v|_{\Gamma_-}, \end{aligned} \quad (1)$$

где α – некоторый вещественный параметр. Этот оператор самосопряжен. Чтобы ввести точечное взаимодействие, являющееся моделью наночастицы в точке x_0 , мы используем стандартную процедуру “сужения–расширения” (см., например, [20–22]). Именно, мы сужаем исходный оператор на множество гладких функций, обращающихся в нуль в точке x_0 . Замыкание этого оператора есть симметрический оператор с индексами дефекта $(1, 1)$. Функция Грина исходного самосопряженного оператора с особенностью в точке x_0 играет роль дефектного элемента. Самосопряженное расширение суженного оператора дает нам модельный оператор, описывающий точечное взаимодействие (потенциал нулевого радиуса). Расширение неединственно. Его выбор реально означает, что фиксируется значение логарифмической производной волновой функции, умноженной на радиальную координату r , по r [20, 23]. В результате приходим к явно решаемой модели, позволяющей получить решение задачи рассеяния в явном виде:

$$\Psi(x) = \psi(x) + aG(x, x_0, k), \quad (2)$$

где $\psi(x)$ – решение задачи рассеяния без точечного возмущения. При прочих равных условиях именно функция Грина дает эффект присутствия наночастицы. Соответственно, необходимо изучить поведение функции Грина около точки x_0 для раковой и нормальной клеток, т.е. асимптотики функции Грина в окрестности x_0 в случаях большой и малой кривизны поверхности в точке x_0 . Рассмотрим эту задачу.

Функция Грина $G(x, x_0, k)$ с особенностью в точке $x_0 \in \Gamma = \partial\Omega$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} G(x, x_0, k) &= (4\pi|x-x_0|)^{-1} e^{ik|x-x_0|} + \\ &+ v(x, x_0, k), \end{aligned} \quad (3)$$

где $v(x, x_0, k)$ – решение следующей краевой задачи

$$\begin{aligned} \Delta v + k^2 v &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial n}\Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial v}{\partial n}\Big|_{\Gamma_-} &= \alpha v + \alpha \frac{e^{ik|x-x_0|}}{4\pi|x-x_0|}. \end{aligned} \quad (4)$$

Функцию $v(x, x_0, k)$ ищем как потенциал простого слоя

$$\begin{aligned} v(x, x_0, k) &= \\ &= \int_{\Gamma} \rho(s, x_0) (4\pi|x-s|)^{-1} \exp(ik|x-s|) ds. \end{aligned} \quad (5)$$

Учитывая вид предельного значения нормальной производной потенциала простого слоя на границе, преобразуем граничное условие для функции v (14) к следующему интегральному уравнению для функции $\rho(x, x_0)$

$$\begin{aligned} \rho(x, x_0) + \int_{\Gamma} \rho(s, x_0) \\ \left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \\ \frac{e^{ik|x-s|}}{8\pi^2|x-s|} ds = \alpha \frac{e^{ik|x-x_0|}}{8\pi^2|x-x_0|}, \quad x \in \Gamma. \end{aligned} \quad (6)$$

Чтобы найти главный член асимптотики функции Грина, мы решаем уравнение (6) методом итераций. Оценка показывает, что поверхностный интеграл имеет следующее асимптотическое поведение при $|x-x_0| \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} I = \int_{\Gamma} \frac{ds}{|x-s||s-x_0|} &= 2\pi\sqrt{1+L^2+N^2} \ln \frac{1}{|x-x_0|} + \\ &+ O(|x-x_0|^0), \end{aligned} \quad (7)$$

где L, N – главные кривизны поверхности Γ в точке x_0 . Следовательно, функция Грина $G(x, x_0, k)$ с особенностью в точке $x_0 \in \Gamma = \partial\Omega$ для оператора Лапласа в $L_2(\mathbf{R}^3)$, возмущенного потенциалом, сосредоточенным на Γ , имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} G(x, x_0, k) &= \frac{e^{ik|x-x_0|}}{4\pi|x-x_0|} + \\ &+ \frac{\alpha\sqrt{1+L^2+N^2}}{16\pi^2} \ln \frac{1}{|x-x_0|} + O(|x-x_0|^0). \end{aligned} \quad (8)$$

3. Исследование резонансов в задаче рассеяния. Теперь обратимся к вычислению и оценке резонансов, которые в этой задаче появляются как полюса матрицы рассеяния. Решение задачи рассеяния для оператора Лапласа имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \Psi(x, \nu, k) &= \psi(x, \nu, k) + \\ &+ c\psi(x_0, \nu, k) G(x, x_0, k) \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\psi(x, \nu, k)$ – проходящая волна, $c\psi(x_0, \nu, k)G(x, x_0, k)$ – рассеянная волна на нерегулярности границы в точке x_0 . Чтобы найти резонансы, решаем следующее уравнение

$$S(k)e = 0, \tag{10}$$

где $S(k)$ – матрица рассеяния для нашей задачи. При данной матрице рассеяния задача ставится так: требуется найти такие значения спектрального параметра k , при которых существуют нетривиальные решения уравнения

$$\int_{\Sigma_1} S(\nu, \nu', k) e(\nu') d\nu' + \frac{ik}{2\pi} c\psi(x_0, \nu, k) \times \int_{\Sigma_1} \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu' = 0 \tag{11}$$

т.е. найти соответствующие $e, e \in L_2(\Sigma_1), \Sigma_1 = \{v : |v| = 1\}$. Следуя [21], можно преобразовать уравнение (11) следующим образом

$$e(\nu'') = -\frac{ik}{2\pi} \int_{\Sigma_1} d\nu [S]^{-1}(\nu'', \nu, k) \times \int_{\Sigma_1} c\psi(x_0, \nu, k) \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu', \tag{12}$$

где $[S]^{-1}(\nu'', \nu, k)$ – ядро оператора $[S]^{-1}$. Так как клетка – замкнутый звездный рассеиватель, оператор-функция $S(k)$ с обобщенным ядром $S(\nu, \nu', k)$ невозмущенной задачи не имеет корней в полосе $0 \leq \text{Im } k \leq \delta$ в верхней полуплоскости k . Поэтому по принципу симметрии этот оператор может быть продолжен в полосу $|\text{Im } k| \leq \delta$ и является обратимой ограниченной оператор-функцией. Используя следующее соотношение

$$([S]^{-1}(k)\psi)(x, \nu'', k) = \overline{\psi(x, \nu'', \bar{k})}, \tag{13}$$

получаем

$$e(\nu'') = -\frac{ik}{2\pi} c\psi(x_0, \nu'', \bar{k}) \times \int_{\Sigma_1} d\nu' \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu'. \tag{14}$$

Пусть $k_{n_0}^2 = \lambda_{n_0}$ – собственные значения рассеивателя. Рассмотрим уравнение (14) в окрестности одного из этих значений. Обратим внимание на коэффициент c в (9). Он выражается в терминах функции $D(k)$ следующим образом:

$$D(k) = \lim_{x \rightarrow x_0} (G(x, x_0, k) - \text{Re } G(x, x_0, k_0)). \tag{15}$$

Коэффициент c пропорционален $(D(k))^{-1}$. При нашем выборе точечного взаимодействия имеем $c = (D(k))^{-1}$. Следовательно, необходимо рассмотреть

поведение этой функции в окрестности k_m . Для этого используем формулу Рисса–Герглотца и преобразование Фурье

$$D(k) = (k^2 - k_0^2) \sum_n \frac{|\psi_n(x_0)|^2}{(\lambda_{n_0} - \lambda)(\lambda_{n_0} - k_0^2)} + \int \left(\frac{1}{s - \lambda} - \left(\frac{1}{s - \lambda_0} + \frac{1}{s - \bar{\lambda}_0} \right) \right) d\xi_s(x_0, x_0), \tag{16}$$

где первый член связан со спектральным проектором, соответствующим дискретному спектру, $\psi_n(x)$ – собственная функция, соответствующая собственному значению λ_{n_0} , $\xi_s(x_0, x_0)$ – ядро спектрального проектора, соответствующего непрерывному спектру, которое допускает представление

$$\xi(x, y) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{|\mathcal{x}| < s} \varphi(x, \mathcal{x}) \overline{\varphi(y, \mathcal{x})} d^3 \mathcal{x}. \tag{17}$$

Таким образом, уравнение (16) преобразуется к виду

$$D(k) = (k^2 - k_0^2) \sum_n \frac{|\psi_n(x_0)|^2}{(\lambda_{n_0} - \lambda)(\lambda_{n_0} - k_0^2)} + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \sqrt{s} ds \left[\frac{1}{s - \lambda} - \frac{s}{(s - \sigma_0)^2 + \delta_0^2} \right] \times \int_{\Sigma_1} |\varphi(x_0, \nu, \sqrt{s})|^2 d\nu, \quad \lambda_0 = \sigma_0 + i\delta_0. \tag{18}$$

Поэтому для спектрального параметра k^2 , близкого к собственному значению $k_{n_0}^2$, имеем

$$\frac{c}{k^2 - k_{n_0}^2} = c_{n_0} + o\left((k^2 - k_{n_0}^2)^0\right), \tag{19}$$

$$c_m = \lim_{k \rightarrow k_{n_0}} \frac{c}{k^2 - k_{n_0}^2}.$$

Тогда, принимая во внимание (19), уравнение (14) преобразуем к форме

$$e(\nu'') = \frac{-ik}{2\pi} (k^2 - k_{n_0}^2) \int_{\Sigma_1} c(k^2 - k_{n_0}^2) \times \overline{\psi(x_0, \nu'', \bar{k})} \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu'. \tag{20}$$

Нетривиальное решение уравнения (20) существует, только если определитель Фредгольма равен нулю. Значит, если $k - k_{n_0}$ мало, то можно получить представление

$$1 = -\frac{ik}{2\pi} (k^2 - k_{n_0}^2) \int_{\Sigma_1} c_{n_0} \overline{\psi(x_0, \nu, \bar{k})} \psi(x_0, \nu, k) d\nu. \tag{21}$$

Мы хотим найти решение $k = k_n$ уравнения (21) в

окрестности $k = k_{n_0}$, где $k \approx k_n$ и, соответственно, $k + k_n \approx 2k_n$. Учитывая это, получаем

$$k_n = k_{n_0} + \frac{i\pi}{k_{n_0}^2 c_n \int_{\Sigma_1} |\psi^{\text{ex}}(x_0, \nu, k_{n_0})|^2 d\nu} + o\left((k^2 - k_{n_0}^2)^0\right). \quad (22)$$

Обратимся теперь к оценке модуля волновой функции. Волновая функция задачи может быть представлена как сумма падающей и рассеянной волн

$$\psi^{\text{ex}}(x, \nu, k) = e^{ik(x, \nu)} + \psi_0^{\text{ex}}(x, \nu, k). \quad (23)$$

Мы ищем рассеянную волну в виде потенциала простого слоя

$$\psi_0^{\text{ex}}(x, \nu, k) = \int_{\Gamma} \rho(s, \nu) \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds. \quad (24)$$

Эта функция удовлетворяет следующей краевой задаче

$$\begin{aligned} \Delta \psi_0^{\text{ex}} + k^2 \psi_0^{\text{ex}} &= 0, \\ \frac{\partial \psi_0^{\text{ex}}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial \psi_0^{\text{ex}}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_-} &= \alpha \psi_0^{\text{ex}} + \alpha e^{ik(x, \nu)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Тогда, используя значение нормальной производной потенциала простого слоя на границе, мы приходим к следующему интегральному уравнению для $\rho(x, \nu)$:

$$\begin{aligned} \rho(x, \nu) + \int_{\Gamma} \rho(s, \nu) \times \\ \times \left(\cos(n_x, x-s) \left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) - \alpha \right) \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds = \\ = \alpha e^{ik(x, \nu)}. \end{aligned} \quad (26)$$

Решаем уравнение с помощью итераций. Рассмотрим уравнение на гладкой поверхности Γ , $x_0 \in \Gamma$:

$$\begin{aligned} I &= \int_{\Gamma} \frac{ds}{|x-s|} ds = \\ &= \sqrt{1+L^2+N^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\epsilon \frac{|s|d|s|}{|x-s|} + O(|x|^0) = \\ &= \sqrt{1+L^2+N^2} \text{const} + O(|x|^0), \end{aligned} \quad (27)$$

где L, N – коэффициенты второй квадратичной формы на касательной плоскости в точке x_0 . Значит, решение задачи рассеяния имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi^{\text{ex}}(x, \nu, k) &= e^{ik(x, \nu)} + \\ &+ \alpha \sqrt{1+L^2+N^2} \text{const} + O(|x|^0). \end{aligned} \quad (28)$$

Видно, что увеличение кривизны приводит к локальному увеличению рассеянного акустического поля около точки, где кривизна велика. Обсудим это в следующем разделе.

4. Результаты моделирования. Чтобы проиллюстрировать эффект, мы провели вычислительные эксперименты на модельных областях. В вычислительной модели брались следующие значения параметров:

- Частота падающей волны – 4 МГц;
- размер клетки – 10 микрон;
- скорость звука в среде:
 - в воде – 1470 м/с,
 - в клетке – 1540 м/с.

Что касается геометрии модельной задачи, здоровая клетка представлена сферой, а раковая – правильными многогранниками (додекаэдром, икосаэдром, октаэдром, в порядке возрастания кривизны в некоторых точках). Материал клеток легких был использован при расчетах как материал клетки. Клетка окружена водой. Наночастицы внутри клетки представлены точечными источниками акустических волн.

Ожидалось, что значение давления в случае раковой клетки, т.е. для одного из правильных многогранников, будет больше для сферы (т.е. у здоровой клетки), из-за большей кривизны поверхности многогранника в некоторых точках. Рисунок 1 показы-

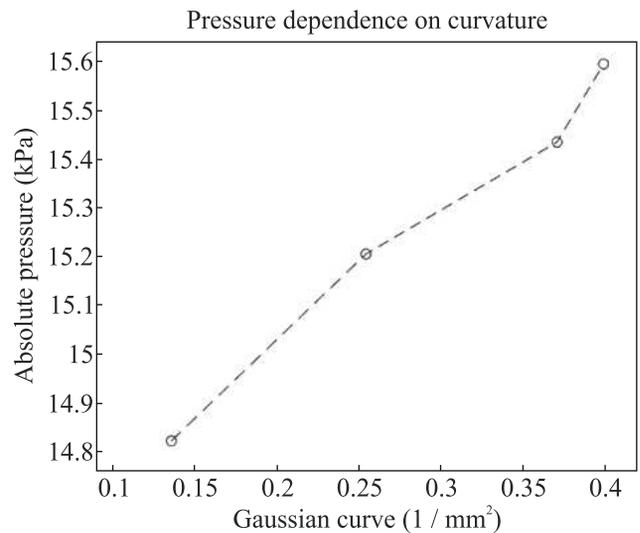


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость абсолютного давления от гауссовой кривизны, используя сферу, додекаэдр, икосаэдр, октаэдр

вает зависимость абсолютного давления от гауссовой кривизны для всех случаев. Рисунки 2, 3 показывают вычисление полного акустического давления для нормальной и раковой клеток, соответственно. Приведенные на рис. 2, 3 результаты подтверждают,

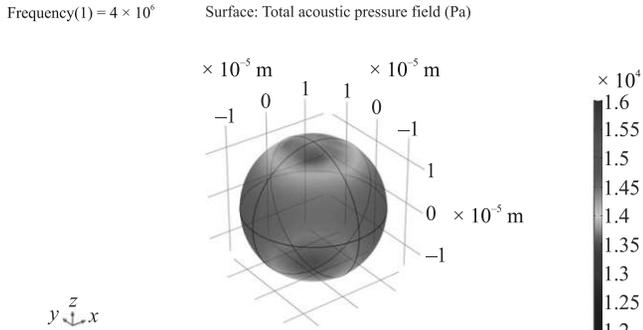


Рис. 2. (Цветной онлайн) Полное акустическое давление в здоровой клетке

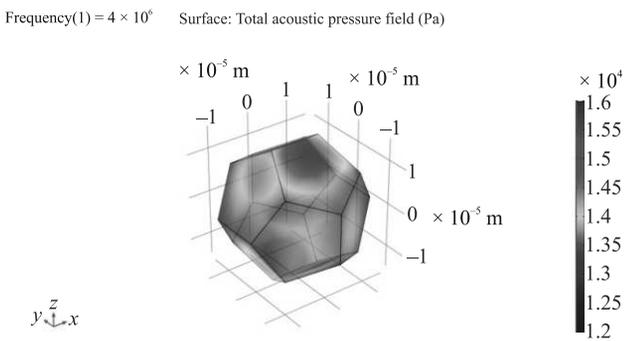


Рис. 3. (Цветной онлайн) Полное акустическое давление в раковой клетке

что при прочих равных условиях полное акустическое давление в случае раковой клетки больше, чем в случае нормальной клетки, если наночастица находится вблизи точки большей кривизны границы (на рис. 2, 3 это верхняя точка тела).

5. Заключение. Сравним рассеяние плоской акустической волны клеточной мембраной раковой и нормальной клеток в случае, когда клеточная мембрана содержит наночастицы. В соответствии с принципом Гюйгенса–Френеля, наночастица становится дополнительным точечным источником вторичных акустических волн. Соответственно, решение задачи рассеяния имеет вид (2). Мы хотим сравнить рассеяние для мембран раковой и нормальной клеток, т.е. для негладкой поверхности Γ с большой кривизной в точке x_0 и для гладкой поверхности Γ с малой кривизной в точке x_0 . Мы предполагаем, что первый член (2), т.е. решение $\psi(x)$ задачи рассеяния в случае отсутствия наночастицы, одинаково в

обоих случаях. Что касается следующего члена (2), видна разница. Формула (8) показывает, что главный член асимптотики не зависит от кривизны, а вот второй член (с логарифмической сингулярностью) существенно больше для случая большой кривизны. Что касается соответствующей физической системы, это означает, что в окрестности наночастицы акустическое поле существенно больше в случае раковой клеточной мембраны.

Что касается резонансов, необходимо вернуться к уравнению (22) и проанализировать эффект для волновой функции при акустическом рассеянии клеточной мембраной раковой и здоровой клеток.

Во-первых, рассмотрим решение задачи рассеяния (28), т.е. мы сравниваем решения в случае гладкой поверхности Γ с малой кривизной и в случае негладкой поверхности Γ с большой кривизной в точке x_0 . Из постановки задачи (23) видно, что первый член в падающей волне не различается в обоих случаях, однако следующий член (28) становится значительно больше при увеличении кривизны поверхности.

Во-вторых, анализируем итоговую формулу для резонансов и вклад волновой функции в это значение. В этой формуле (22), мнимая часть резонанса k_n обратно пропорциональна модулю волновой функции. Соответственно, для случая большой кривизны, т.е. раковой клетки, мнимая часть резонанса становится меньше, чем для случая малой кривизны, т.е. для случая нормальной клетки. Если мнимая часть резонанса уменьшается, его время жизни растет, а поэтому такое состояние вызывает больший деструктивный эффект.

Соответственно, предпочтительное разрушение ультразвуковым полем раковых клеток по сравнению с нормальными. Этот вывод соответствует результатам работы [8]. Этот эффект открывает возможность разработки нового пути разрушения раковых клеток, который безопасен для пациента – внедрение в клетку инертных наночастиц (т.е. золотых наночастиц как в экспериментах [8]) и облучение ультразвуковым полем.

Работа частично поддержана грантом # 22-11-00046 Российского научного фонда.

1. B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter, *Molecular Biology of the Cell*, fourth edition, Garland Science, N.Y. (2002).
2. T. Baumgart, S. T. Hess, and W. W. Webb, *Nature* **425**, 821 (2003).

3. K. Bacia, P. Schwille, and T. Kurzchalia, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **102**, 3272 (2005).
4. I. F. Melikhov and I. Y. Popov, Chin. J. Phys. **65**, 334 (2020).
5. I. F. Melikhov and I. Y. Popov, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **9**(4), 447 (2018).
6. S. J. Marrink, V. Corradi, P. C. T. Souza, H. I. Ingolfsson, D. P. Tieleman, and M. S. P. Sansom, Chem. Rev. **119**(9), 6184 (2019).
7. P. L. Yeagle, *The Membranes of Cells*, third edition, Academic Press, N.Y. (2016).
8. O. K. Kosheleva, T.-C. Lai, N. G. Chen, M. Hsiao, and C. H. Chen, Journal of Nanobiotechnology **14**, 46 (2016).
9. T. A. Tran, J. Y. L. Guennec, P. Bougnoux, F. Tranquart, and A. Bouakaz, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control **55**, 43 (2008).
10. I. Yu. Popov, Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **118**, 555 (1995).
11. I. Yu. Popov, J. Math. Phys. **33**(5), 1685 (1992).
12. T. Ikebe and S. Shimada, J. Math. Kyoto Univ. **31**(1), 219 (1991).
13. I. Yu. Popov, Proc. Royal Soc. London A **452**, 1505 (1996).
14. P. Exner and D. Kreicirik, Rev. Math. Phys. **13**, 307 (2001).
15. J. Behrndt, M. Langer, and V. Lotoreichik, Nanosystems: Phys. Chem. Math. **7**(2), 290 (2016).
16. A. Mantile and A. Posilicano, Nanosystems: Phys. Chem. Math. **7**(2), 315 (2016).
17. P. Exner, S. Kondej, and V. Lotoreichik, J. Math. Phys. **59**, 013051 (2018).
18. A. M. Vorobiev, A. S. Bagmutov, and A. I. Popov, Nanosystems: Phys. Chem. Math. **10**(4), 415 (2019).
19. J. Behrndt, P. Exner, M. Holzmann, and V. Lotoreichik, Math. Nachr. **290**, 12151248 (2017).
20. B. S. Pavlov, Russ. Math. Surv. **42** (6), 127 (1987).
21. I. Yu. Popov, Matematicheskii sbornik, **181**(10), 1366 (1990) [English: Mathematics of the USSR-Sbornik **71**(1), 209 (1992)].
22. A. S. Melikhova, M. P. Faleeva, and I. Y. Popov, Nanosystems: Phys. Chem. Math. **12**(2), 115 (2021).
23. Yu. N. Demkov and V. N. Ostrovskii, *Zero-Range Potentials and Their Applications in Atomic Physics*, Springer, Berlin (1988).

Содержание

Том 118, выпуск 1

Поля, частицы, ядра

- Zakharov B.G.** Jet quenching in mini-quark-gluon plasma: Medium modification factor I_{pA} for photon-tagged jets 3

Астрофизика и космология

- Volovik G.E.** On the global temperature of the Schwarzschild–de Sitter spacetime 5

Оптика, лазерная физика

- Быкова Д.В., Афанасьев А.Е., Балыкин В.И.** Острая фокусировка атомного пучка с использованием доплеровского и суб-доплеровского механизмов лазерного охлаждения в двумерной магнито-оптической ловушке 7

- Belonovskii A.V., Evtikhiev V.P., Mitrofanov M.I., Nikolaev V.V.** Strong coupling of exciton in organic material and plasmonic WGM localized on the surface of silver nanoparticles 14

- Свяховский С.Е.** Формирование фемтосекундных импульсов произвольной формы при помощи одномерного фотонного кристалла с непрерывной пространственной модуляцией показателя преломления 16

- Грузинцев А.Н.** Зависимость резонансного обращения волнового фронта света на поляритонах от интенсивности оптической накачки в пленках оксида цинка 23

- Городничев Е.Е., Рогозкин Д.Б.** Слабая локализация света в магнитоактивной среде 30

Конденсированное состояние

- Irkhin V.Yu.** Magnetism, non-Fermi-liquid behavior and deconfinement in Kondo lattices 37

- Зайнуллина В.М., Коротин М.А., Кожевников В.Л.** Эволюция электронных свойств твердых растворов $\text{SrFe}_{1-x-y-z}\text{Al}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_3$ в зависимости от состава и степени локализации электронных состояний 39

- Николаев С.Н., Черноглазов К.Ю., Емельянов А.В., Ситников А.В., Талденков А.Н., Пацаев Т.Д., Васильев А.Л., Ганьшина Е.А., Демин В.А., Аверкиев Н.С., Грановский А.Б., Рыльков В.В.** Аномальное поведение туннельного магнетосопротивления в нанокompозитных пленочных структурах $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}/\text{Si}$ ниже порога перколяции: проявления со-туннельных и обменных эффектов 46

- Хисамеева А.Р., Щепетильников А.В., Николаев Г.А., Лопатина С.А., Федотова Я.В., Кукушкин И.В.** Плазменные возбуждения в SiGe/Si квантовых ямах 55

Квантовая информатика

Кулик С.П., Молотков С.Н. MDI – Measurement Device Independent квантового распределения ключей	62
---	-----------

Содержание
Том 118, выпуск 2
Поля, частицы, ядра

Пуртова А.А., Станкевич К.Л., Студеникин А.И. Влияние квантовой декогеренции на коллективные осцилляции нейтрино	73
Савельев И.М., Кайгородов М.Ю., Кожедуб Ю.С., Тупицын И.И., Шабаев В.М. Расчеты разности энергий связи многозарядных ионов Ho и Dy	77
Конденсированное состояние	
Яблуновский А., Чукалина Е.П., Ёин Л.Х., Попова М.Н. Спектроскопия высокого разрешения кристалла ErCrO_3 : новый фазовый переход?	82
Родионов Д.А., Загороднев И.В. Плазмоны в полосе с анизотропным двумерным электронным газом, сильно экранированным металлическим затвором	90
Метлов К.Л. Топологическая память на многосвязных планарных магнитных нанозементах ...	95
Lebed A.G. A method to reveal and investigate almost m2D Fermi surfaces in layered conductors: universal resistivity in a parallel magnetic field	102
Петров А.В., Никитин С.И., Тагиров Л.Р., Камзин А.С., Юсупов Р.В. Нетепловая фотоиндуцированная редукция коэрцитивного поля в тонких эпитаксиальных пленках $L1_0$ -фазы FePt и $\text{FePt}_{0.84}\text{Rh}_{0.16}$	104
Денисов К.С., Барышников К.А., Алексеев П.С. Эффекты памяти в магнетосопротивлении двухкомпонентных электронных систем	110
Долганов П.В., Спириденко Н.А., Долганов В.К., Кац Е.И., Бакланова К.Д. Каскадное образование топологических дефектов и сателлитных капель при динамической капиллярной неустойчивости в жидких кристаллах	118
Веденеев С.И. Регистрация излучения, вызванного движением джозефсоновских вихрей в монокристалле $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_{6+\delta}$ в высоких магнитных полях, непосредственно внутри образца	125
Методы теоретической физики	
Закирова З., Лунев В., Белобородов Н. pq -дуальность: набор примеров	131
Биофизика	
Попов И.Ю., Юрова Т.С. Резонансы для явно решаемой модели ультразвукового рассеяния мембраной клетки	135

