



ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ *и* ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 163, ВЫПУСК 3

МАРТ 2023

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Аттосекундная интерферометрия при участии дискретных состояний Попова М. М.,
Юдин С. Н., Грызлова Е. В., Киселев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н. 297
- Пространственная структура плазменных потоков в магнитных полях лазерной плазмы
..... Беляев В. С., Загребов В. С., Крайнов В. П., Матафонов А. П. 309
- Взаимодействие двух заряженных диэлектрических шаров с точечным зарядом
..... Родин М. М., Филиппов А. В. 321

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Генерация продольного ультразвука импульсами сдвиговой деформации в режиме спин-фононного
эха Сазонов С. В. 335

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

- Критическая точка на кривой магнитных фазовых переходов первого рода Валиев Э. З. 344
- Исследование сверхтонких взаимодействий в синтезированных при высоком давлении соединениях
 $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ ($0 \leq x \leq 1$) методом Мёссбауэровской спектроскопии
..... Боков А. В., Магницкая М. В., Саламатин Д. А., Цвященко А. В. 350
- Динамическая трансформация доменных стенок в киральных ферромагнетиках .. Кулагин Н. Е. 357
- Синхронизация автоколебаний магнитных вихрей в обменно-связанных ферромагнитных дисках ..
..... Татарский Д. А., Миронов В. Л., Фраерман А. А. 366
- Нелинейная динамика гейзенберговского ферромагнетика на полуоси Киселев В. В. 375

О гальваномагнитных свойствах двумерной модели Рэлея	Балагуров Б. Я.	387
--	-----------------	-----

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Механизм поперечного транспорта заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора	Исламов Д. Р., Перевалов Т. В., Гисматулин А. А., Азаров И. А., Спесивцев Е. В., Гриценко В. А.	392
Квантовые осцилляции межслойной проводимости в многослойном топологическом изоляторе ...	Алисултанов З.З., Абдуллаев Г.О., Григорьев П.Д., Демиров Н.А.	401
Эффект Холла в допированном мотт-халбардовском диэлектрике	Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В., Хомский Д. И.	417

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Модель фрактальной организации хроматина в двумерном пространстве	Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Пустовойт П. М., Яшина Е. Г.	428
Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы гелия при постоянной конечной температуре 21000 К при давлениях ДО 600 ГПа	Мочалов М. А., Ильяев Р. И., Фортов В. Е. , Ерунов С. В., Аринин В. А., Бликов А. О., Огородников В. А., Рыжков А. В., Комраков В. А., Ковалев А. Е., Новиков М. Г., Максимкин И. П., Финюшин С. А., Чудаков Е. А., Лихутов М. И., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Левашов П. Р., Минаков Д. В., Парамонов М. А.	439

АТТОСЕКУНДНАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ ПРИ УЧАСТИИ ДИСКРЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ

М. М. Попова ^{a,b*}, С. Н. Юдин ^b, Е. В. Грызлова ^b, М. Д. Киселев ^{a,b,c,d},

А. Н. Грум-Гржимайло ^{b,d}

^a Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Физический факультет
119991, Москва, Россия

^b Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

^c Лаборатория моделирования квантовых процессов,
Тихоокеанский государственный университет
680035, Хабаровск, Россия

^d Университет ИТМО, Физический факультет
197101, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 4 октября 2022 г.,
после переработки 4 октября 2022 г.
Принята к публикации 20 октября 2022 г.

Теоретически рассматриваются особенности RABBITT (Reconstruction of Attosecond Beating By Interference of Two-photon Transitions) спектроскопии в условиях, когда существенную роль играют переходы через состояния дискретного спектра. Применяется два подхода: численное решение скоростных уравнений с дискретизацией континуума и теория возмущений в третьем порядке по амплитуде. Оба подхода используют матричные элементы переходов и амплитуды фотоионизации, полученные высокоточным методом R -матрицы. В рамках этих подходов получены фотоэлектронные спектры, амплитуда и фаза RABBITT-осцилляций, изучено влияние интенсивности затравочного оптического поля и отстройки от резонанса при возбуждении дискретных состояний.

DOI: 10.31857/S004445102303001X
EDN: QDEOHW

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение динамики малых квантовых систем в сверхбыстром масштабе активно развивается в связи с появлением интенсивных и ультракоротких импульсных источников света в вакуумном ультрафиолетовом (ВУФ) и рентгеновском режимах. Развитие источников излучения, основанных на генерации гармоник высокого порядка (HNG) [1, 2], привело к возникновению аттосекундной метрологии, что позволило исследовать динамику электронов в атомах, молекулах и твердых телах в естественной временной шкале [3–7]. Прогресс в технике генерации позволяет получать импульсы короче 100 ас [8–11].

Методы аттосекундной интерферометрии, основанные на фотоэмиссии, можно разделить на streaking-спектроскопию [12–15] с использованием единичного аттосекундного импульса и RABBITT, где используется последовательность импульсов [4, 16, 17]. Сравнительные преимущества и недостатки RABBITT- и streaking-спектроскопии обсуждаются в [18].

Метод RABBITT (Reconstruction of Attosecond Beating By Interference of Two-photon Transitions) основан на использовании последовательности ВУФ-импульсов для ионизации мишени совместно с затравочным ИК- или оптическим импульсом [19] и варьировании времени его задержки относительно ВУФ для извлечения информации об относительных фазах амплитуд переходов. Поскольку ВУФ-компоненты ω_N являются (как правило, нечетными) гармониками оптического/ИК лазера ω_{ir} , то

* E-mail: mm.popova@physics.msu.ru

$\omega_N = N\omega_{ir}$. Высокочастотный импульс переводит электрон в состояние непрерывного спектра, называемое основной линией (mainline — ML), а интенсивное низкочастотное поле создает боковые линии (sidebands — SB) [20] при энергиях, соответствующих дополнительному поглощению или испусканию n низкочастотных фотонов $\omega_N \pm n\omega_{ir}$ (рис. 1). В низшем порядке теории возмущений можно показать, что интерференция между переходами, вызванными поглощением фотона с частотой ω_N с последующим поглощением фотона с частотой ω_{ir} и поглощением фотона ω_{N+2} с испусканием ω_{ir} , приводит к тому, что величина SB осциллирует на удвоенной частоте ИК-поля ω_{ir} при изменении времени его задержки τ относительно ВУФ:

$$SB(\tau) = a + b \cos(2\omega_{ir}\tau - \phi_{max}). \quad (1)$$

Для импульсов, содержащих большое число оптических циклов, изменение задержки импульса эквивалентно изменению фазы ИК-поля $\phi_{ir} = \omega_{ir}\tau$ относительно ВУФ.

Обзор ограничений, накладываемых на RABBITT-спектроскопию длиной импульса, фазовыми флуктуациями и статистикой измерений, представлен в [21].

Для описания и интерпретации RABBITT использовались подходы, основанные на различных вариациях теории возмущений [22–24], в том числе и при учете релятивистских поправок, приближении сильного поля [25], решении нестационарного уравнения Шредингера [26–30] и, наконец, нестационарной версии R -матрицы [31]. Два последних метода, несомненно, эффективны для моделирования, но практически не позволяют анализировать вклады различных процессов, т. е. являются, по сути, разновидностью численного эксперимента.

В настоящей работе мы предлагаем и тестируем подход, основанный на решении скоростных уравнений с использованием полученных с необходимой спектроскопической точностью дипольных матричных элементов переходов. Мы применяем метод стационарной R -матрицы [32] для описания переходов между состояниями дискретного спектра и континуума; метод устранения расходимости [33, 34] для описания переходов между состояниями континуума. Для проверки и анализа результатов решения скоростных уравнений мы проводим сравнение с результатами, полученными в рамках теории возмущений. Развиваемый нами метод применен к исследованию RABBITT осцилляций в примыкающей к порогу области непрерывного спектра атома неона (рис. 1).

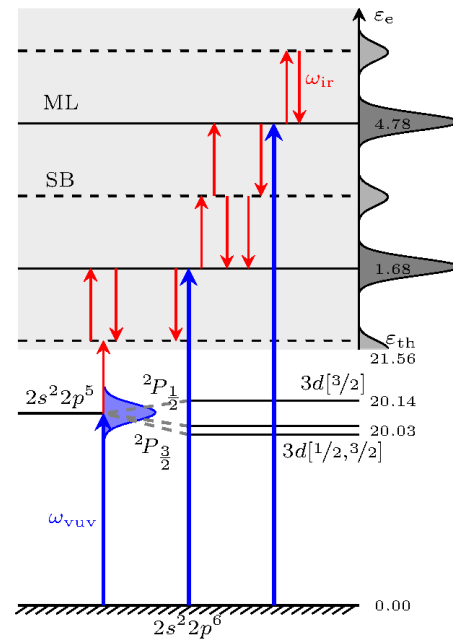


Рис. 1. Схема многочастотной «ВУФ+ИК»-ионизации атома неона при несущей длине волны $\lambda \approx 800$ нм и ВУФ-поле, состоящем из 13, 15 и 17 ее гармоник

Особенность этой области, привлекавшей в последнее время усиленное внимание как теоретиков, так и экспериментаторов [27, 35–37], — участие в формировании спектра переходов через дискретные состояния. Вклад последних доминирует в припороговой области, т. е. в нижайших основной и боковой линиях. Ранее подобное усиление некоторых переходов отмечалось в области автоионизационных, или квазидискретных, состояний [38–42].

Везде, где не отмечено иное, используется атомная система единиц.

2. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ

Поле представляет собой сумму инфракрасного поля (обозначаемого как «ir») и нескольких гармоник N -го порядка в ВУФ-диапазоне (обозначаемых « N »):

$$\mathbf{E}(t) = \sum_N \cos^2(t/\sigma_N) \mathbf{n}_\lambda g_\lambda^N E_N \cos(\omega_N t + \phi_N) + \mathbf{n}_\lambda g_\lambda^{ir} E_{ir} \cos^2(t/\sigma_{ir}) \cos(\omega_{ir} t + \phi_{ir}). \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{n}_\lambda g_\lambda$ — вектор поляризации, представленный в виде разложения по ортам в циклическом базисе $\mathbf{n}_\lambda$ [43]. Если ось z совпадает с направлением распространения гармоник, то $\lambda = \pm 1$, иначе допускается компонента $\lambda = 0$ (в частности, для линейно поляризованного вдоль оси z поля существует только компонента $\lambda = 0$). $E_{N,ir}$ — на-

пряженность соответствующей гармоники. В качестве огибающей мы используем полупериод косинуса, так как он обладает необходимыми условиями гладкости поля и его первой производной в начале и конце импульса. Отметим, что для гауссовского импульса $\exp(-x^2/2\sigma_\Gamma^2) \approx 1 - x^2/2\sigma_\Gamma^2$, а для косинуса $\cos^2(x/\sigma) \approx 1 - x^2/\sigma^2$, т.е., чтобы иметь такое же поведение в максимуме, как и при гауссовской огибающей, должно удовлетворяться соотношение $\sigma = \sqrt{2}\sigma_\Gamma$. При генерации ННГ ширина ВУФ-импульса $\sigma_{\Gamma,N}$ не зависит от номера гармоники и связана с шириной затравочного импульса как $\sigma_{\Gamma,N} = \sigma_{\Gamma,ir}/2$. Типичная длительность ННГ-импульса составляет порядка 10–20 фс, т.е. в нем укладываются десятки или даже сотни оптических циклов. ИК-импульс начинается в момент $-t_{ir} = -\pi/2\sigma_{ir}$, а ВУФ соответственно в $-t_N = -\pi/2\sigma_N$.

Векторный потенциал получается из напряженности (2) как

$$\mathbf{A}(t) = -c \int_{-\infty}^t \mathbf{E}(t') dt' = \sum_h \mathbf{A}_h(t). \quad (3)$$

Векторный потенциал каждой из гармоник ($h = N, ir$) электромагнитного поля $\mathbf{A}_h(t)$ представлен в виде разложения:

$$\mathbf{A}_h(t) = c \sum_\lambda \mathbf{n}_\lambda g_\lambda^h A_h^+(t) e^{-i(\omega_h t + \phi_h)} + (-1)^{(1-\lambda)} \mathbf{n}_{-\lambda} g_{-\lambda}^{h*} A_h^-(t) e^{i(\omega_h t + \phi_h)}, \quad (4)$$

где $A_h^\pm(t)$ — коэффициент при $\exp(\mp i(\omega_h t + \phi_h))$, определяемый как

$$\begin{aligned} A_h^\pm(t) \exp(\mp i\omega_h t) &= \\ &= \frac{1}{2} \int_{-t_h}^t \cos^2(t'/\sigma_h) E_h \exp(\mp i\omega_h t') dt' \approx \\ &\approx \cos^2(t/\sigma_h) \frac{E_h}{\mp 2i\omega_h} \exp(\mp i\omega_h t), \end{aligned} \quad (5)$$

т.е. в рассматриваемом случае длинного импульса огибающая векторного потенциала практически неотличима от огибающей напряженности поля.

3. РЕШЕНИЕ СКОРОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ (РСУ)

Представим полный гамильтониан $\hat{H}$ атома в поле электромагнитного излучения как

$$\hat{H} = \hat{H}_{at} + \hat{H}_{int}(t), \quad (6)$$

где $\hat{H}_{at}$ и $\hat{H}_{int}(t)$ — атомный (невозмущенный) га-

мильтониан и гамильтониан взаимодействия с электромагнитным полем. Тогда многочастичная волновая функция электронов в атоме подчиняется уравнению Шредингера:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = (\hat{H}_{at} + \hat{H}_{int}(t)) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (7)$$

В электрическом дипольном приближении Гамильтониан взаимодействия имеет вид [44]

$$\hat{H}_{int}(t) = \frac{1}{c} A(t) \mathbf{p}. \quad (8)$$

Разложим $\Psi(\mathbf{r}, t)$ по собственным функциям $\phi_{n(\epsilon)}(\mathbf{r})$ невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_{at}$:

$$\hat{H}_{at} \phi_{n,\epsilon}(\mathbf{r}) = \epsilon_{n(\epsilon)} \phi_{n(\epsilon)}(\mathbf{r}), \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_n t} + \\ &+ \int d\epsilon_\epsilon a_\epsilon(t) \phi_\epsilon(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_\epsilon t}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь индекс $n(\epsilon)$ обозначает полный набор квантовых чисел, необходимых для описания состояний дискретного и непрерывного спектров: угловые моменты в соответствующей схеме связи, их проекции и энергию состояния. Далее для краткости, если специально не оговорено иное, один индекс будет использоваться для обозначения состояний как дискретного, так и непрерывного спектра.

Для коэффициентов разложения $a(t)$ можно получить систему дифференциальных уравнений первого порядка, определяющих эволюцию заселенности атомных состояний (каналов непрерывного спектра) во времени:

$$\frac{da_f(t)}{dt} = -i \sum_i \int e^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)t} \langle \phi_f | \hat{H}_{int}(t) | \phi_i \rangle a_i(t). \quad (11)$$

Мы используем матричные элементы перехода в форме скорости

$$\begin{aligned} \langle \phi_f | \hat{H}_{int}(t) | \phi_i \rangle &= \frac{1}{c} \langle \phi_f | A(t) \mathbf{p} | \phi_i \rangle = \\ &= \sum_{h,\lambda^h} (g_\lambda^h A_h^+(t) e^{-i\omega_h t} + g_{-\lambda}^{h*} A_h^-(t) e^{i\omega_h t}) \times \\ &\times \frac{(J_i M_i, 1\lambda | J_f M_f)}{\hat{J}_i} \langle \phi_n | \mathbf{p} | \phi_i \rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\langle \phi_f | \mathbf{p} | \phi_i \rangle$ — приведенный матричный элемент перехода, $(J_i M_i, 1\lambda | J_f M_f)$ — коэффициент Клебша–Гордана, $\hat{J} = \sqrt{J(J+1)}$.

Система уравнений (11) решалась численно с использованием приведенных матричных элементов, полученных методами, описанными в разд. 5.

Для описания состояний непрерывного спектра в (11) применялся метод дискретизации континуума,

в котором интегрирование заменяется суммированием,

$$\int a(\epsilon) d\epsilon \rightarrow \sum_i a(\epsilon_i) d\epsilon, \quad (13)$$

а возникающий при суммировании множитель $d\epsilon$ включается в коэффициенты разложения и матричные элементы:

$$a_\epsilon \sqrt{d\epsilon} \rightarrow a_{\epsilon_i}, \quad (14)$$

$$\langle \phi_n | \hat{H}_{int}(t) | \phi_\epsilon \rangle \sqrt{d\epsilon} \rightarrow \langle \phi_n | \hat{H}_{int}(t) | \phi_{\epsilon_i} \rangle, \quad (15)$$

$$\langle \phi_\epsilon | \hat{H}_{int}(t) | \phi_{\epsilon'} \rangle d\epsilon \rightarrow \langle \phi_\epsilon | \hat{H}_{int}(t) | \phi_{\epsilon'} \rangle. \quad (16)$$

Тогда $|a_{\epsilon_i}|^2$ — вероятность найти электрон с энергией в окрестности $d\epsilon$ точки ϵ_i .

Код реализован и зарегистрирован авторами статьи [45]. При расчетах диапазон энергий электронов непрерывного спектра составлял (0, 0.36) ат. ед., что позволяло исследовать боковые линии до SB18. Эффект от обрезания области интегрирования в представленной части спектра составляет порядка 1%. Вычисления проводились с равномерным шагом разбиения по энергии $d\epsilon$, величины этих шагов варьировались ($d\epsilon = 0.002 \div 0.004$ ат. ед.) для исследования сходимости. В реализованной программе изначально была заложена возможность изучать произвольные поляризации излучения, поэтому состояния континуума могли иметь любые возможные при данном моменте проекции. Размерность системы дифференциальных уравнений была порядка 10 000.

4. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ (ТВ)

Формулы, представленные в этом разделе, применимы для линейно поляризованных в одном направлении гармоник в системе координат, где ось z сонаправлена с вектором поляризации.

В рамках нестационарной теории возмущений коэффициенты $a_k(t)$ в уравнении (11) раскладываются в ряд

$$a_f(t) = a_f^{(0)}(t) + a_f^{(1)}(t) + a_f^{(2)}(t) + \dots, \quad (17)$$

где $a_f^{(0)}(t) = \delta_{fi}$ — решение в отсутствие возмущения. В первом порядке ТВ в уравнении (11) остается только одно слагаемое

$$\frac{da_f^{(1)}(t)}{dt} = -ie^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)t} \langle \phi_f | \hat{H}_{int}(t) | \phi_i \rangle. \quad (18)$$

Дополнив ТВ приближением вращающейся волны, т. е. оставив только близкое к резонансу первое сла-

гаемое в (12), можно записать формальное решение уравнения (18) в виде

$$a_f^{(1)}(t) = -i \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \phi_f | \mathbf{p} | \phi_i \rangle \times \times \int_{-t_N}^{t_N} \sum_N A_N(t) e^{-i(\omega_N t + \phi_N)} e^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)t} dt. \quad (19)$$

В первом порядке ТВ есть только однофотонные переходы под действием ВУФ-излучения, поэтому в фотоэлектронном спектре наблюдаются только основные линии (ML) при энергиях электронов $\epsilon_f = N\omega_{ir} - \epsilon_i$ (ϵ_i — энергия атома в основном состоянии), а какие-либо осцилляции отсутствуют.

Во втором порядке ТВ присутствуют двухфотонные переходы через дискретные возбужденные состояния и состояния непрерывного спектра, связанные со взаимодействием системы с ИК-полем. Формально решение (19) является начальным условием для (18), и для $a_f^{(2)}(t)$ имеем

$$\frac{da_f^{(2)}(t)}{dt} = -i \sum_k e^{i(\epsilon_f - \epsilon_n)t} \langle \phi_k | \hat{H}_{int}(t) | \phi_n \rangle a_n^{(1)}(t), \quad (20)$$

$$a_f^{(2)}(t) = \frac{(-i)^2}{\sqrt{3}\hat{J}} (10, 10 | J0) \langle \phi_f | \mathbf{p} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \mathbf{p} | \phi_i \rangle \times \times \int_{-t_{ir}}^{t_{ir}} A_{\omega_{ir}}^\pm(t) e^{\pm i(\omega_{ir} t + \phi_{ir})} e^{i(\epsilon - \epsilon_n)t} \times \times \int_{-t_N}^{t \leq t_N} \sum_N A_N(t') e^{-i(\omega_N t' + \phi_N)} e^{i(\epsilon_n - \epsilon_i)t'} dt' dt. \quad (21)$$

Здесь знак $\pm$ отвечает за удержание значимого члена в разложении несущей $\cos(\omega_{ir} t + \phi_{ir})$ при расчете переходов с поглощением ($-$) и испусканием ($+$) фотона. В дальнейшем будем обозначать первый канал как $(N) + 1$, а второй — как $(N) - 1$, где число в скобках — номер ВУФ-гармоники, а знак определяет поглощение или испускание ИК-фотона. Амплитуда « $(N) + 1$ » зависит от фазы ИК-поля как $\exp(-i\phi_{ir})$, а амплитуда « $(N + 2) - 1$ », приводящая к состояниям той же энергии, — как $\exp(i\phi_{ir})$. Их интерференция приводит к тому, что величина SB осциллирует на удвоенной частоте ω_{ir} .

Так как в ТВ вероятность обнаружить фотоэлектрон в основной фотолнии и в боковых полосах описывается квадратом суммы переходов с участием нечетного и четного числа фотонов n , соответственно, второй порядок теории возмущений не влияет на основные линии ML.

Таблица 1. Нижние дипольно-разрешенные возбужденные состояния атома неона, их энергия, приведенный матричный элемент возбуждения из основного состояния (RME) и лидирующие конфигурации

Состояние	E , эВ	RME	Лидирующие конфигурации
$2p^5(^2P_{3/2})3s[\frac{3}{2}]$	16.67	-0.25	$-0.92 2p^53s^3P\rangle - 0.39 2p^53s^1P\rangle$
$2p^5(^2P_{1/2})3s[\frac{1}{2}]$	16.85	0.60	$-0.38 2p^53s^3P\rangle + 0.92 2p^53s^1P\rangle$
$2p^5(^2P_{3/2})4s[\frac{3}{2}]$	19.69	-0.19	$-0.69 2p^54s^3P\rangle - 0.71 2p^54s^1P\rangle$
$2p^5(^2P_{1/2})4s[\frac{1}{2}]$	19.78	-0.18	$0.71 2p^54s^3P\rangle - 0.69 2p^54s^1P\rangle$
$2p^5(^2P_{3/2})3d[\frac{1}{2}]$	20.03	0.10	$0.89 2p^53d^3P\rangle - 0.43 2p^53d^1P\rangle - 0.12 2p^53d^3D\rangle$
$2p^5(^2P_{3/2})3d[\frac{3}{2}]$	20.04	-0.17	$0.27 2p^53d^3P\rangle + 0.72 2p^53d^1P\rangle - 0.64 2p^53d^3D\rangle$
$2p^5(^2P_{1/2})3d[\frac{3}{2}]$	20.14	0.13	$-0.36 2p^53d^3P\rangle - 0.54 2p^53d^1P\rangle - 0.76 2p^53d^3D\rangle$
$2p^5(^2P_{3/2})5s[\frac{3}{2}]$	20.57	-0.12	$-0.62 2p^55s^3P\rangle - 0.78 2p^55s^1P\rangle$
$2p^5(^2P_{1/2})5s[\frac{1}{2}]$	20.66	0.08	$-0.76 2p^55s^3P\rangle + 0.60 2p^55s^1P\rangle$

Второй порядок по амплитуде соответствует четвертому порядку по сечению. Следовательно, для основных линий МЛ для достижения того же уровня точности мы должны учесть

интерференцию амплитуд первого и третьего порядков.

Амплитуда в третьем порядке теории возмущений равна

$$\begin{aligned}
a_f^{(3)}(t) = & \frac{(-i)^3}{\sqrt{3}\hat{j}} \sum_{nkJ_n} \frac{1}{\hat{j}_n} (10, 10 | J'_n 0)(10, J'_n 0 | J' 0) \langle \phi_f || \mathbf{p} || \phi_k \rangle \langle \phi_k || \mathbf{p} || \phi_n \rangle \langle \phi_n || \mathbf{p} || \phi_i \rangle \times \\
& \times \int_{-t_{ir}}^{t_{ir}} A_{\omega_{ir}}^{\pm}(t) e^{\pm i(\omega_{ir}t + \phi_{ir})} e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_k)t} \int_{-t_{ir}}^t A_{\omega_{ir}}^{\pm}(t') e^{\pm i(\omega_{ir}t' + \phi_{ir})} e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon_n)t'} \times \\
& \times \int_{-t_N}^{t'' \leq t_N} \sum_N A_n(t'') e^{-i(\omega_N t'' + \phi_N)} e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon_i)t''} dt'' dt' dt.
\end{aligned} \quad (22)$$

Амплитуды « $(N) + 1 - 1$ » и « $(N) - 1 + 1$ », очевидно, как и первый порядок ТВ, не зависят от фазы ИК-поля; амплитуды « $(N + 2) - 2$ » и « $(N - 2) + 2$ » ведут себя как $\exp(\pm 2i\phi_{ir})$. Вероятность обнаружить фотоэлектрон в основной линии МЛ

$$|a_f^{(1+3)}|^2 \approx |a_f^{(1)}|^2 + 2 \operatorname{Re} [a_f^{(1)} a_f^{(3)*}]. \quad (23)$$

Слагаемые, отвечающие за интерференцию первого « (N) » и третьего « $(N \pm 2) \mp 2$ » порядков, как и в SB, осциллируют на удвоенной частоте ИК-поля $2\omega_{ir}$.

При ионизации инертного газа ($J_i = 0$) линейно поляризованными в одном направлении гармониками для переходов, вызванных четным числом фотонов, возможны только четные полные моменты J , вызванных нечетным числом фотонов — только нечетные J .

5. СПЕКТРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Дипольные матричные элементы переходов между дискретными состояниями и между дискретными состояниями и состояниями континуума были получены в $J\kappa$ -схеме связи методом R -матрицы [32]. Таким образом, квантовыми числами, характеризующими состояние, были полный момент J_f ионного остова $2p^{5/2}P_{J_f}$, орбитальный момент электрона дискретной nl или непрерывной εl части спектра, промежуточное квантовое число κ — результат их векторного сложения, $\kappa = J_f + l$, и, наконец, полный момент системы $J = \kappa + 1/2$, где $1/2$ — спин электрона. Выбор $J\kappa$ -схемы связан с необходимостью аккуратного учета переходов из состояний дискретного спектра в состояния непрерывного спектра с различным полным моментом конечного иона J_f

(расщепленным на 0.1 эВ) в низкоэнергетической области спектра.

В расчетах использовалась та же спектроскопическая модель, что и в [46]: учитывались все возможные термы конфигураций $1s^2 2s^2 2p^5 ns$ ($n = 3, 4, 5, 6$), $1s^2 2s^2 2p^5 nd$ ($n = 3, 4, 5$), $1s^2 2s^2 2p^4 3s 3p$, $3p 4s$, и $1s^2 2s^1 2p^5 3s 3d$ и использовались экспериментальные энергии порогов [47].

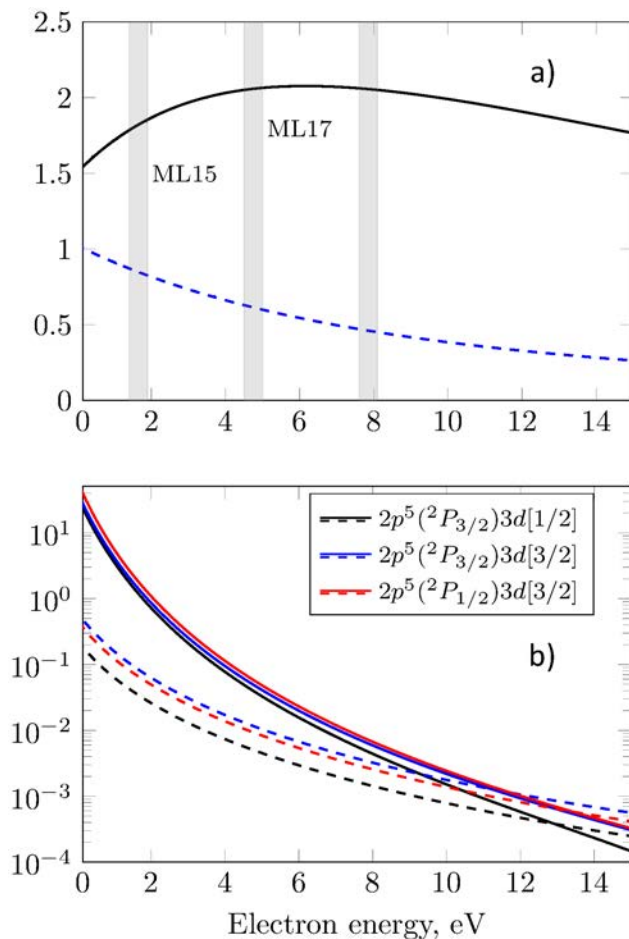


Рис. 2. *a)* Сумма квадратов приведенных матричных элементов перехода в s -волны (синяя штриховая линия) и d -волны (черная сплошная линия) при ионизации из основного состояния. Серые вертикальные полосы обозначают положения основных линий (ML19 участвует в образовании SB18, но не показана на спектрах). *b)* Сумма квадратов матричных элементов ионизации из возбужденных состояний в каналы с участием p -волны (штриховые линии) и f -волны (сплошные линии)

В табл.1 приведены дискретные состояния, включенные в расчеты, их энергии, приведенные дипольные матричные элементы перехода из основного состояния и лидирующие конфигурации. По коэффициентам смешивания видно, что, за исключением нижней конфигурации с возбуждением

$3s$ -орбитали, остальные состояния описываются скорее в Jk -схеме связи. Энергии возбуждения дискретных состояний таковы, что для нашей цели — исследования роли дискретных состояний — разумно выбрать область $3d$ -состояний, так как, в отличие от $3s$ и $4s$, они могут быть ионизованы одним фотоном 800 нм и эффективно возбуждены его гармоникой $N = 13$, и при этом неплохо отделены по энергии от ближайших состояний $4s$ и $5s$.

На рис. 2 представлены суммы квадратов модулей матричных элементов переходов из основного состояния в каналы с участием s - и d -волны (*a*) и из состояний $2p^5 3d$ в каналы с участием p - и f -волны (*b*). В то время как для переходов из основного состояния оба канала сопоставимы по величине, для переходов из возбужденных состояний каналы с f -волной превосходят каналы с участием p -волны на два порядка.

Вычисление матричных элементов перехода между состояниями непрерывного спектра (континуум–континуум) проводилось в предположении, что для этих состояний можно пренебречь любыми корреляциями фотоэлектрона и электронов остаточного иона. Сначала с помощью программного пакета MCHF [48] была найдена самосогласованная волновая функция иона $2p^5 2P$, а затем — волновые функции электронов в поле этого иона P_{el} . Затем методом, описанным в работах [33, 34], вычислялись радиальные матричные элементы континуум–континуум $R_{\epsilon l, \epsilon' l'}$. Необходимо отметить, что матричные элементы связи состояний непрерывного спектра $R_{\epsilon l, \epsilon' l'}$ имеют полюс при $\epsilon \rightarrow \epsilon'$, который в подходе [33] выделяется в явном виде как

$$\delta(\epsilon_i - \epsilon_j) \sqrt{2\epsilon} \text{sign}(l_i - l_j) \cos(\sigma_{l_i} + \delta_{l_i} - \sigma_{l_j} - \delta_{l_j}). \quad (24)$$

Здесь δ_l и σ_l — кулоновская фаза и фаза рассеяния.

Связь $R_{\epsilon l, \epsilon' l'}$ и приведенных матричных элементов в Jk -схеме связи можно получить, используя квантовую теорию углового момента [49]:

$$\begin{aligned} \langle \epsilon', (J_f l') k', \frac{1}{2} : J' || \hat{D} || (J_f l) k, \epsilon, \frac{1}{2} : J \rangle = \\ = \langle \epsilon', l' || \hat{D} || \epsilon, l \rangle \times \\ \times (-1)^{J_f + l - J - 1/2} \hat{k} \hat{k}' \hat{j} \hat{j}' \left\{ \begin{matrix} J_f & l & k \\ 1 & k' & l' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & J & k \\ 1 & k' & J' \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\langle \epsilon', l' || \hat{D} || \epsilon, l \rangle = \hat{l}(l0, 10 | l0) R_{\epsilon l, \epsilon' l'}. \quad (26)$$

Конструкция в фигурных скобках — это $6j$ -символ Вигнера.

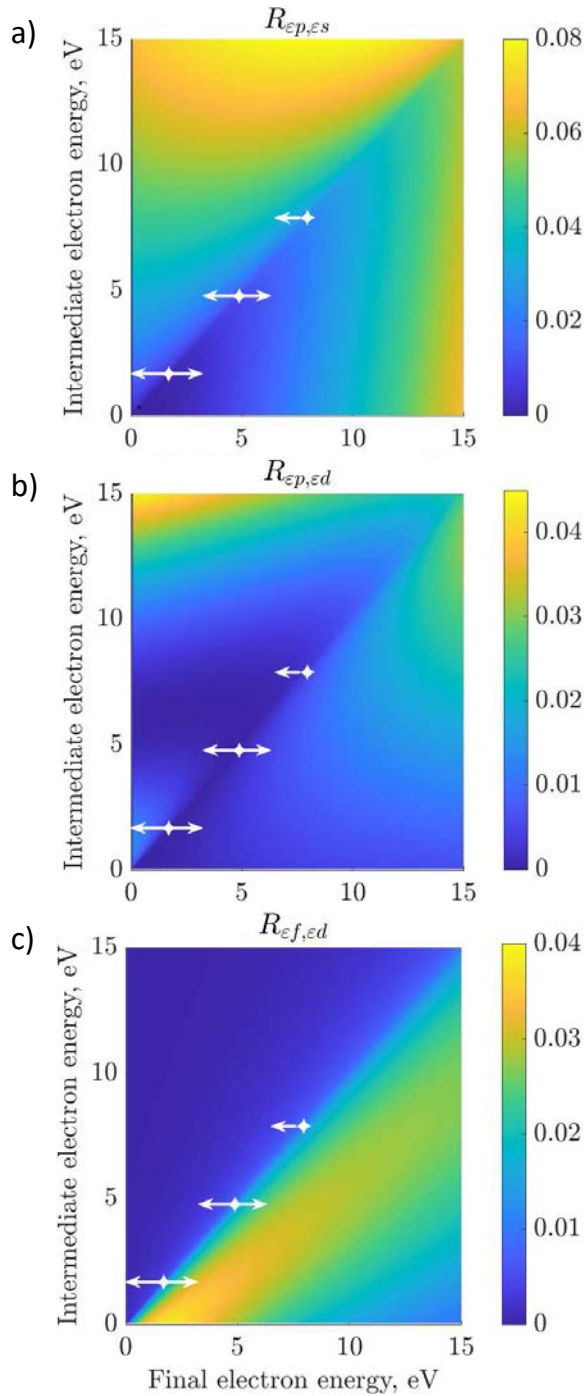


Рис. 3. Квадраты радиальной части матричных элементов переходов между состояниями континуума: (а) из s -волны в p -волну; (б) из d в p ; (с) из d в f . Точками отмечены энергии основных линий, а стрелочками влево (вправо) — боковые частоты, соответствующие переходам с испусканием (поглощением) фотона

На рис. 3 приведены квадраты радиальных частей (26), точками отмечены энергии основных линий, а стрелочками — энергии боковых линий, т. е. части, дающие максимальный вклад за счет времен-

ного интеграла (19). Переходы в p -волну с поглощением и испусканием фотона сопоставимы по величине и в области низких энергий (до 5 эВ) невелики. Переходы из d -волны в f -волну с точностью до двух-трех процентов совпадают с формулой Гордона [50, 51] и существенно асимметричны: идут в основном с поглощением фотона и дают определяющий вклад в низкоэнергетической части спектра.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для расчетов мы выбрали параметры поля в соответствии с реализуемыми сейчас на установках ННГ; поле включает в себя нечетные гармоники с 11 по 19 с напряженностью $E_N = 10^{-4}$ ат. ед. и длительностью $\Gamma_N = 10$ фс, и инфракрасное поле с напряженностью в диапазоне $E_{ir} = (2.5-10) \cdot 10^{-3}$ ат. ед. и в два раза большей длительностью $\Gamma_{ir} = 20$ фс. Фазы гармоник являются изменяемыми параметрами, и здесь мы положили их нулевыми. В этой работе мы исследуем окрестность $3d$ -резонанса и будем изменять несущую частоту ω_{ir} . Разумный диапазон перестройки длины волны ИК-гармоники: 798, 800, 802, 804 и 806 нм, этому соответствуют частоты ω_{ir} : 1.5537, 1.5498, 1.5459, 1.5421, 1.5383 эВ, и соответственно частоты 13-й гармоники $13\omega_{ir}$: 20.20, 20.15, 20.10, 20.05, 20.00 эВ. Подчеркнем, что изменение частоты ИК-поля автоматически означает изменение частоты всех гармоник, так как это поле является для них затравочным.

На рис. 4а представлены результаты расчетов при длине волны затравочного поля 800 нм по теории возмущений и методом решения скоростных уравнений. Пики при 1.8 и 4.8 эВ — это основные линии, результат ионизации 15-й и 17-й гармониками (ML15, ML17); пики при 0.2, 3.2 и 6.2 эВ — это боковые частоты (SB14, SB16, SB18). Подчеркнем, что, хотя в расчетах учитывалась 19-я гармоника, спектр обрезан при энергии, соответствующей боковой линии SB18, так как диапазон релевантных данных на $2\omega_{ir}$ меньше, чем диапазон энергий, учитываемых в расчетах. Положения пиков, полученных РСУ, отличаются для различных интенсивностей ИК-поля из-за динамического штарковского сдвига и приближается к положениям по ТВ для меньшей напряженности $E_{ir} = 2.5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. Вероятности генерации боковых линий SB16 и SB18 для напряженностей $E_{ir} = 2.5 \cdot 10^{-3}$, $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-2} ат. ед. относятся как 1 : 4 : 16, т. е. для них сохраняется пертурбативный режим. Для частоты SB14, где сильную роль играют переходы через дискретные состояния, пер-

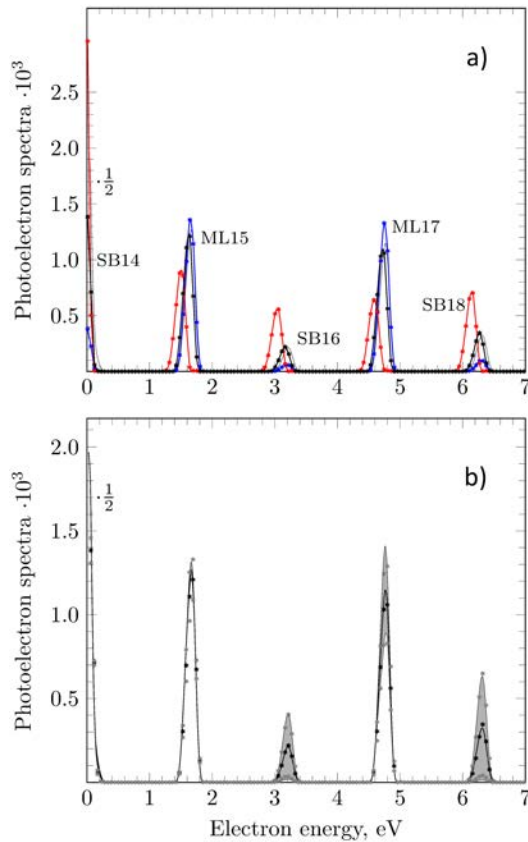


Рис. 4. *a)* Усредненный по фазе спектр фотоэлектронов при длине волны затравочного поля 800 нм, полученный PCY для напряженности ИК-поля $E_{ir} = 2.5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. (синяя линия), $5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. (черная), 10^{-2} ат. ед. (красная). Тонкая серая линия — результат ТВ для $E_{ir} = 5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. *b)* Усредненный спектр (черная линия — ТВ, черные точки — PCY), максимальная и минимальная величины фотоэлектронных пиков (серая линия — ТВ, серые точки — PCY) для напряженности $E_{ir} = 5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. Разница между максимальной и минимальной величинами фотоэлектронных пиков в ТВ окрашена серым цветом. Для удобства сравнения результаты PCY здесь и далее сдвинуты по энергии к положениям по ТВ

турбативный режим нарушается.

На рис. 4*b* представлены результаты расчетов усредненного спектра и максимальной и минимальной величин фотоэлектронных пиков для $E_{ir} = 5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. Для удобства сравнения здесь и далее результаты, полученные PCY, сдвинуты по энергии к положениям по ТВ. Как спектры, так и амплитуда осцилляций, за исключением ближайших к порогу SB14 и ML15 линий, полученные обоими методами, совпадают. Разница в первых двух является результатом эффектов высшего порядка и будет предметом дальнейшего исследования.

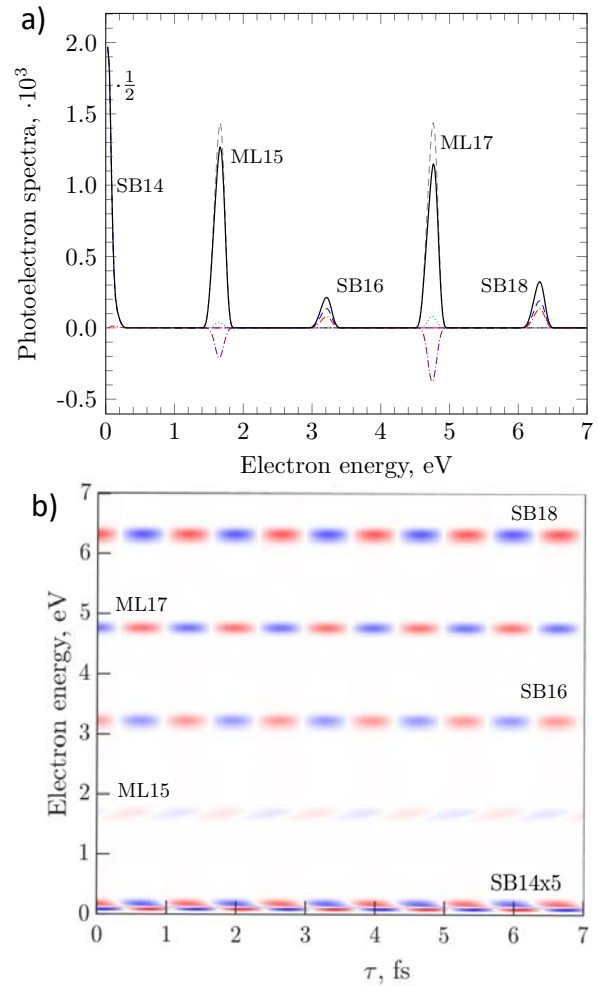


Рис. 5. *a)* Усредненный по фазе ИК-поля спектр при 800 нм и $E_{ir} = 5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед., полученный по теории возмущений. Жирная черная линия обозначает итоговый спектр; серая штриховая — первый порядок ТВ; красная штрихпунктирная — второй порядок ТВ, происходящий с испусканием ИК-фотона; синяя штриховая — второй порядок ТВ с поглощением ИК-фотона; сиреневая штрихпунктирная — вклад интерференции первого и третьего порядков; голубыми точками отмечен вклад от третьего порядка ТВ. *b)* Осцилляции (RABBITT traces) как функции задержки ИК-импульса и энергии фотоэлектронов. Величина осцилляций в SB14 представлена с фактором 5

На рис. 5*a* показаны вклады отдельных переходов в итоговый спектр. Ожидаемо, что интерференция первого и третьего порядков (сиреневая штрихпунктирная линия в области ML) должна иметь тот же порядок малости, что и боковые линии SB. Величина SB растет с ростом энергии, и переходы между состояниями непрерывного спектра, происходящие с испусканием ИК-фотона (красная штрихпунктирная линия) систематически ниже, чем переходы, происходящие с поглощением ИК-фотона (синяя штриховая линия). Роль переходов из состо-

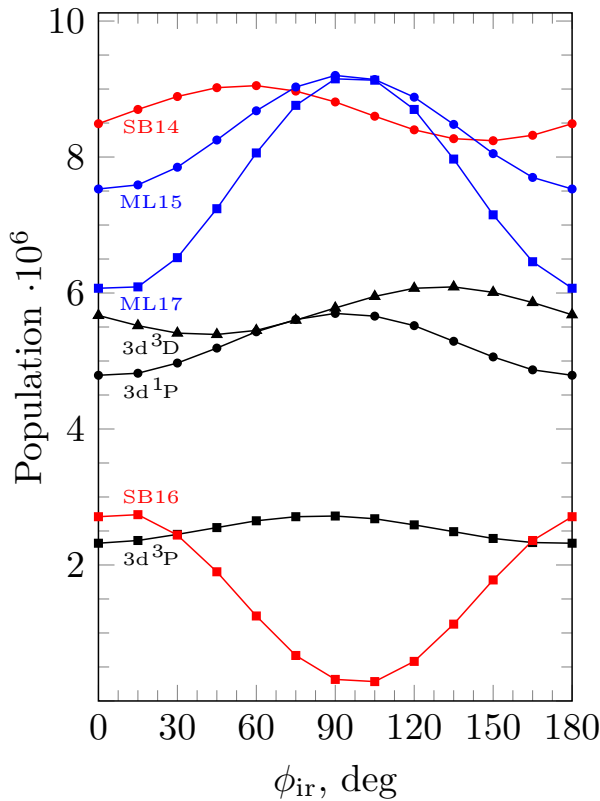


Рис. 6. Зависимости от фазы ИК-поля заселенности дискретных состояний $2p^{5/2}P_{3/2}3d[\frac{1}{2}]$, $2p^{5/2}P_{3/2}3d[\frac{3}{2}]$ и $2p^{5/2}P_{1/2}3d[\frac{3}{2}]$, обозначенных по лидирующей конфигурации как 3P , 1P и 3D соответственно, и состояний непрерывного спектра SB14, ML15, SB16, проинтегрированных по энергии (площадь соответствующего пика). Символами отмечены значения фаз, при которых проводился расчет

яний непрерывного спектра в припороговую боковую линию SB14 крайне мала. Для двухфотонных переходов, идущих с поглощением ИК-фотона, доминируют амплитуды перехода в f -волну, для идущих с испусканием — в p -волну (см. рис. 3) в соответствии с обобщением тенденции Фано (Fano's Propensity Rule) [52].

На рис. 5b показано традиционное для RABBITT-спектроскопии представление данных: двумерная зависимость величины осцилляций от задержки ИК-импульса (фазовый сдвиг) и энергии фотоэлектрона (спектр при данной величине задержки с вычетом усредненного по фазе ИК-импульса спектра). Амплитуда осцилляций растет с ростом энергии фотоэлектрона, а фазы отличаются для различных линий, причем в ML и SB практически противоположны. Поскольку для эффективной интерференции и значительных осцилляций необходим сопоставимый вклад от переходов, происходящих с поглощением $(N) + 1$ и испусканием $(N + 2) - 1$ ИК-фотонов, то ожидаемо,

что осцилляции в SB14 будут незначительны (на рис. 4b они представлены с увеличением в 5 раз).

Вероятность эмиссии электрона при каждой энергии зависят от ϕ_{ir} как $\cos(\phi_{max} - \phi_{ir})$, где ϕ_{max} — фаза, при которой величина боковой линии максимальна. Для расчетов по ТВ эта зависимость следует из (18)–(23). Для РСУ это необходимо проверить, так как высшие порядки могут давать вклады, осциллирующие в два, четыре и более раз быстрее. На рис. 6 приведены зависимости от фазы для заселенности дискретных состояний $2p^{5/2}(P_{3/2})3d[\frac{1}{2}]$, $2p^{5/2}(P_{3/2})3d[\frac{3}{2}]$, $2p^{5/2}(P_{1/2})3d[\frac{3}{2}]$ и различных линий (SB14, ML15, SB16) в непрерывном спектре, интегрированных по энергии. Видно, что при данной интенсивности ИК-поля зависимость от фазы хорошо аппроксимируется косинусом. Анализ методом наименьших квадратов показал, что аппроксимация расчетов косинусом осуществляется с относительной точностью выше, чем 10^{-2} , кроме линии SB14, где точность порядка 0.1.

Поскольку при любой фиксированной энергии зависимость от фазы ИК-поля ϕ_{ir} представляется косинусом, двумерный рис. 3b сводится к одномерному, т. е. зависимости амплитуды осцилляций и их фазы от энергии. На рис. 7 эти зависимости приведены для пяти разных длин волн затравочного ИК-поля: поскольку изменение длины волны проявляется только для нижних линий SB14 и ML15, весь спектр приведен только для энергии ИК-фотона 800 нм. Некоторый намек на дублетную структуру, особенно заметный при $\lambda = 798$ и 800 нм, является проявлением тонкого расщепления порога ионизации $2p^{5/2}P_{3/2,1/2}$ при ионизации, идущей преимущественно через верхнюю компоненту $2p^{5/2}(P_{1/2})3d[\frac{3}{2}]_1$; при увеличении длины волны начинают эффективно возбуждаться и компоненты $2p^{5/2}(P_{3/2})3d[k]_1$, которые преимущественно ионизируются на нижний порог $2p^{5/2}P_{3/2}$. Из-за совпадения величины расщепления компонент $3d$ -состояния и порога ионизации в спектре остается одна линия. ТВ систематически недооценивает переходы через континуум в нижнюю ML15 при любой энергии затравочного ИК-поля и в меньшей степени в нижнюю SB14. Величина и форма последнего, очевидно, оказывается наиболее чувствительной к небольшим изменениям частоты и является максимальной для 802 нм. В ТВ фаза осцилляций резко меняется для разных компонент резонанса, что является одним из проявлений теоремы Левинсона о связи асимптотического поведения амплитуды с числом связанных состояний [53, 54].

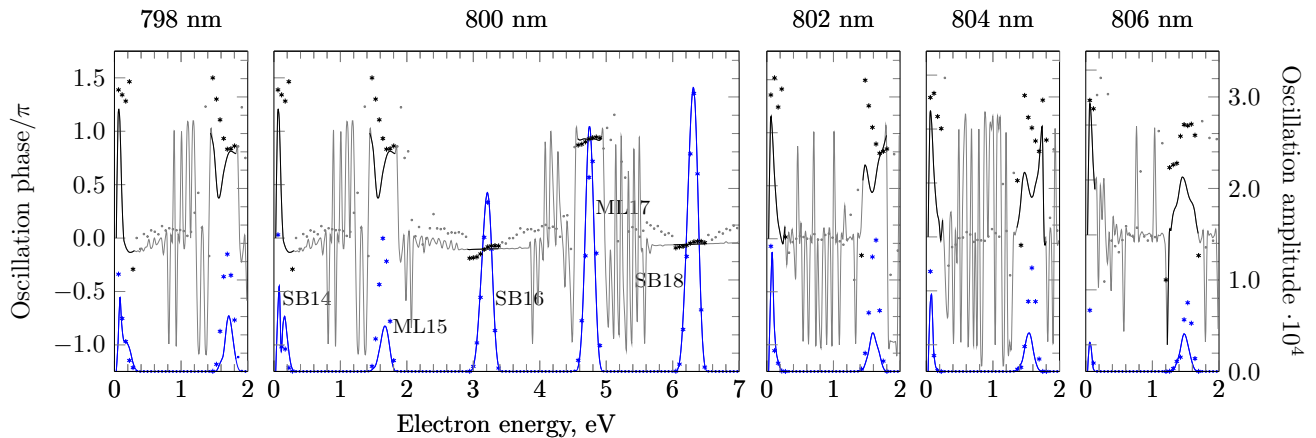


Рис. 7. Величины осцилляций (синие линии и точки) и их фазы (черные линии и точки), рассчитанные по ТВ и РСУ для $E_{ir} = 5 \cdot 10^{-3}$ ат. ед., для различных длин волн затравочного ИК-поля. Результаты ТВ представлены сплошными кривыми, результаты РСУ — точками

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены два подхода для описания ионизации атомов комбинированным многочастотным полем ИК-лазера и его высших гармоник: основанный на нестационарной теории возмущений по третий порядок включительно и основанный на решении системы скоростных уравнений.

Проведены демонстрационные расчеты для ионизации атома неона при параметрах полей, типичных для современной RABBITT-спектроскопии. Получены спектры фотоэлектронов для различных времен задержки (фазового сдвига) ИК-поля относительно ВУФ-гармоник. Определены величины и фазы осцилляций RABBITT для энергий электронов от порога до 7 эВ.

Показано, что при современных интенсивностях полей теория возмущений применима для описания фотоэлектронных спектров в области гладкого континуума, но гораздо хуже воспроизводит поведение примыкающих к порогу основной и боковой линий.

Показано, что возбуждение дискретных состояний с последующей ионизацией — механизм, ответственный за формирование припороговой боковой линии — приводит к ее резкому отличию от остальных. Резонансный механизм обуславливает сильную зависимость припороговой линии от частоты ИК-поля, проявляющуюся как в формировании и изменении ее структуры, так и в скачкообразном изменении фазы осцилляций.

Финансирование. Работы в разд. 2–4 выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-52-12023) и Министерства науки и высшего образо-

вания Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005) с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН». Исследования в разд. 5 выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-42-04412).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
2. А. Ф. Стержантов, М. Ю. Рябикин, В. В. Стрелков, В. Т. Платоненко, *УФН* **186**, 449 (2016).
3. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
4. P. M. Paul, E. S. Toma, P. Breger et al., *Science* **292**, 1689 (2001).
5. R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdörfer, *Faraday Discuss* **163**, 353 (2013).
6. J. Vos, L. Cattaneo, S. Patchkovskii et al., *Science* **360**, 1326 (2018).
7. M. Ossiander, J. Riemensberger, S. Neppl et al., *Nature* **361**, 374 (2018).
8. G. Sansone, E. Benedetti, F. Calegari et al., *Science* **314**, 443 (2006).
9. E. Goulielmakis, M. Schultze, M. Hofstetter et al., *Science* **320**, 1614 (2008).
10. R. López-Martens, K. Varjú, P. Johnsson et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 033001 (2005).

11. V. V. Strelkov, E. Mével, and E. Constant, *New J. Phys.* **10**, 083040 (2008).
12. E. Constant, V. D. Taranukhin, A. Stolow, and P. B. Corkum, *Phys. Rev. A* **56**, 3870 (1997).
13. M. Hentschel, R. Kienberger, Ch. Spielmann et al., *Nature* **414**, 509 (2001).
14. J. Itatani, F. Quéré, G. L. Yudin et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 173903 (2002).
15. M. Schultze, M. Fieß, N. Karpowicz et al., *Science* **328**, 1658 (2010).
16. Y. Mairesse, A. de Bohan, L. J. Frasinski et al., *Science* **302**, 1540 (2003).
17. K. Klünder, J. M. Dahlström, M. Gisselbrecht et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 143002 (2011).
18. L. Cattaneo, J. Vos, M. Lucchini et al., *Opt. Express* **24**, 29060 (2016).
19. V. Vénier, R. Taïeb, and A. Maquet, *Phys. Rev. A* **54**, 721 (1996).
20. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением*, Физматлит, Москва (2001).
21. M. Isinger, D. Busto, S. Mikaelsson et al., *Phil. Trans. Roy. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci.* **377**, 20170475 (2019).
22. J. Benda, Z. Mašín, and J. D. Gorfinkiel, *Phys. Rev. A* **105**, 053101 (2022).
23. E. Lindroth and J. M. Dahlström, *Phys. Rev. A* **96**, 013420 (2017).
24. J. Vinbladh, J. M. Dahlström, and E. Lindroth, *Phys. Rev. A* **100**, 043424 (2019).
25. P. K. Maroju, C. Grazioli, M. D. Fraia et al., *Nature* **578**, 386 (2020).
26. A. Harth, N. Douguet, K. Bartschat et al., *Phys. Rev. A* **99**, 023410 (2019).
27. A. S. Kheifets and A. W. Bray, *Phys. Rev. A* **103**, L011101 (2021).
28. D. Bharti, D. Atri-Schuller, G. Menning et al., *Phys. Rev. A* **103**, 022834 (2021).
29. A. Kheifets, *Atoms* **9**, 66 (2021).
30. J. M. Dahlström, A. L'Huillier, and J. Mauritson, *J. Phys. B* **44**, 095602 (2011).
31. B. I. Schneider, K. R. Hamilton, and K. Bartschat, *Atoms* **10**, 26 (2022).
32. O. Zatsarinny, *Comput. Phys. Commun.* **174**, 273 (2006).
33. T. Mercouris, Y. Komninos, S. Dionissopoulou, and C. A. Nicolaides, *J. Phys. B* **29**, 13 (1996).
34. S. A. Novikov and A. N. Hopersky, *J. Phys. B* **44**, 235001 (2011).
35. M. Swoboda, T. Fordell, K. Klünder et al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 103003 (2010).
36. D. M. Villeneuve, P. Hockett, M. J. J. Vrakking, and H. Niikura, *Science* **356**, 1150 (2017).
37. K. R. Hamilton, K. Bartschat, M. Moiola et al., in *MPS-2022 International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, Book of Abstracts*, 13, Turku, Finland (2022).
38. M. Kotur, D. Guenot, Á. Jiménez-Galán et al., *Nature Comm.* **7**, 10566 (2016).
39. V. Gruson, L. Barreau, Á. Jiménez-Galan et al., *Science* **354**, 734 (2016).
40. M. A. Fareed, V. V. Strelkov, M. Singh et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 023201 (2018).
41. Á. Jiménez-Galán, L. Argenti, and F. Martín, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 263001 (2014).
42. B. Ghomashi, N. Douguet, and L. Argenti, *Phys. Rev. A* **99**, 053407 (2019).
43. Д. А. Варшалович, В. К. Херсонский, Е. В. Орленко, А. Н. Москалев, *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, т. 1, Физматлит, Москва (2017).
44. I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, Springer, Berlin-Heidelberg (1992).
45. С. Н. Юдин, С. М. Бурков, А. Н. Грум-Гржимайло, М. Д. Киселев, В. И. Севериненко, *Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ*, №2021681060 от 17.12.2021 г.
46. М. М. Попова, Е. В. Gryzlova, M. D. Kiselev, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Symmetry* **13**, 1015 (2021).

47. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.8), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2022, October 3]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, USA (2020).
48. C.F. Fischer, T. Brage, and P. Jonsson, *Computational Atomic Structure: An MCHF Approach*, IOP Publ., Bristol (1997).
49. V.V. Balashov, A.N. Grum-Grzhimailo, and N.M. Kabachnik, *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions: A Practical Theory Course*, Kluwer Acad./Plenum Publ., New York (2000).
50. W. Gordon, *Ann. Physik* **394**, 1031 (1929).
51. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, *ЖЭТФ* **119**, 45 (2001) [A. A. Krylovetsky, N. L. Manakov, and S. I. Marmo, *JETP* **92**, 37 (2001)].
52. D. Busto, J. Vinbladh, S. Zhong et al., *Phys. Rev. Lett.* **123**, 133201 (2019).
53. N. Levinson, *Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **25**, 9 (1949).
54. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2004).

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ПЛАЗМЕННЫХ ПОТОКОВ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

В. С. Беляев^{a}, В. С. Загреев^a, В. П. Крайнов^{b**}, А. П. Матафонов^a*

^a *Центральный научно-исследовательский институт машиностроения
141070, Королев, Московская обл., Россия*

^b *Московский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 5 октября 2022 г.,
после переработки 25 октября 2022 г.
Принята к публикации 25 октября 2022 г.

Представлены результаты исследований пространственной структуры плазменных потоков, возникающих при воздействии на поверхность твердой мишени лазерного импульса релятивистской интенсивности (выше 10^{18} Вт/см²). Показано, что экспериментально наблюдаемая в сечении плазменного потока кольцевая структура соответствует тороидальной равновесной плазменной конфигурации, которая возникает в сильных магнитных полях лазерной плазмы. Предложена модель астрофизических токовых струй (джетов), состоящих из дискретной последовательности тороидальных равновесных плазменных структур.

DOI: 10.31857/S0044451023030021

EDN: QDFDDV

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование динамики потоков плазмы в магнитных полях является актуальной, быстро развивающейся областью теоретической и экспериментальной физики. Все это обусловлено большой ролью магнитного поля в плазменных процессах, сильно различающихся по пространственным и временным масштабам.

Целью проведения лабораторных исследований динамики плазменных процессов в магнитных полях является построение удовлетворительной физической модели этих процессов и ее применение на основе теории подобия к решению термоядерных, космических и астрофизических проблем.

Важным аспектом картины взаимодействия плазменных потоков с магнитным полем является пересоединение магнитных силовых линий (так называемое магнитное пересоединение). Магнитное пересоединение — это физический процесс взаимодействия плазмы с магнитным полем, приводящий

к быстрому преобразованию магнитной энергии в кинетическую энергию заряженных частиц плазмы. Источником энергии для этих частиц является магнитное поле, меняющее свою структуру и переходящее в новое равновесное состояние с меньшей энергией [1].

Магнитное пересоединение и связанное с ним образование токовых струй являются важнейшими фундаментальными процессами в астрофизике на масштабах от магнитосфер планет до галактик. Среди всех явлений, вызванных этими процессами, остановимся на формировании равновесных плазменных конфигураций в потоках заряженных частиц в магнитных полях. Формирование таких плазменных структур возможно на самых разных пространственных масштабах, от галактических до лабораторных. Отметим, что в ряде спиральных галактик существуют аномально долгоживущие структуры с противоположно направленными магнитными потоками, время жизни которых сравнимо со временем существования самой галактики [2, 3].

Важнейшим открытием последних лет стало прямое наблюдение вращения у струйных выбросов молодых звезд [4]. Обнаружена круговая поляриметрия изображений в ближнем инфракрасном диапазоне. При моделировании методом Монте-Карло

* E-mail: belyaev@tsniimash.ru

** E-mail: vpkrainov@mail.ru

найден, что магнитное поле вдоль биполярного потока молодого звездного объекта HH 135–136 имеет спиральную форму [5]. Поле сохраняет эту форму на больших расстояниях вдоль выходящего потока. Поэтому структура поля может также обеспечивать необходимое магнитное давление для коллимации этого потока. Как и у струйных выбросов из микроквазаров, в выбросах из молодых звезд выходящий поток на больших расстояниях разбивается на отдельные сгустки [6].

Внутренняя структура астрофизической токовой струи изучалась в 2021 г. в радиообсерватории Karl G. Jansky Very Large Array (штат Нью-Мексико, США) [7]. В ней размещено 27 радиотелескопов, каждый из которых имеет диаметр 25 м. Их общая разрешающая способность за счет разнесения антенн и работы в режиме интерферометра составляет от 0.2 до 0.04 дуговых секунд. Показано, что в токовой струе происходит движение плазмы вдоль каналов, формируемых магнитным полем. Магнитное поле имеет винтовую структуру. Движение плазмы происходит на расстоянии почти 3300 световых лет от сверхмассивной черной дыры галактики. Согласно авторам исследования [7], повышенная мощность спирального магнитного поля на большом расстоянии от черной дыры галактики может быть связана с нестабильностью токовой струи, которая оказывает упорядочивающее действие на магнитное поле. Это хорошо согласуется с представленной нами моделью токовой струи. Неустойчивость в области диффузии токовой струи приводит к быстрому магнитному пересоединению с изменением топологии магнитного поля и к созданию замагниченных тороидальных структур, упорядочивающих магнитное поле. Обнаруженное авторами работы [7] движение токовой струи вдоль каналов, формируемых магнитным полем, которое имеет винтовую структуру, может быть объяснено как «развертка» тороидальной структуры с вращающейся плазмой при ее движении вдоль оси токовой струи. Вращение токовой струи галактики M 87 экспериментально наблюдалось в работе [8]. В этой работе описана стратификация токовой струи с образованием в ее поперечном сечении кольцевой структуры. Лабораторное моделирование такого вращения проведено в работе [9].

Известно образование локализованных магнитных конфигураций плазмы — плазмOIDов в процессе развития так называемых «суббурь» в магнитосфере Земли. Механизм суббурь состоит в высвобождении магнитной энергии, накопленной в магнитосфере, путем замыкания тока в хвосте магни-

тосферы вдоль магнитных линий через ионосферу в ночной части полярного овала. В дальней части хвоста в результате пересоединения магнитных силовых линий вытянутые силовые линии образуют замкнутые петли. Отделившаяся от Земли и движущаяся в хвост магнитосферы часть плазменного слоя, пронизанная замкнутыми петлями магнитного поля и содержащая нейтральную силовую линию, называется плазмOIDом. Таким образом, магнитосфера сбрасывает избыток плазмы и энергии, которую она не может больше удерживать в геомагнитном хвосте [10].

Исследования диссипативных структур привело к обнаружению, изучению и практическому использованию оптических диссипативных вихревых солитонов (автосолитонов), которые являются устойчивыми структурами, пространственно-локализованными вследствие баланса притока и оттока энергии в нелинейной системе [11]. В монографии [12] рассмотрены двух- и трехмерные, в том числе тороидальные, солитоны и топологические дефекты в магнетиках.

К диссипативным структурам, представляющим собой открытые системы вдали от термодинамического равновесия, могут быть отнесены токовые струи и структуры, возникающие в процессах пересоединения магнитных силовых линий [13]. Токовые струи являются неравновесной структурой; в них происходит пересоединение магнитных силовых линий. При этом магнитная конфигурация переходит в состояние с наименьшей потенциальной энергией. Юджин Паркер назвал такой процесс топологической диссипацией [1].

Пространственная плазменная структура в виде тороидальных равновесных конфигураций изучалась в связи с проблемой удержания плазмы в магнитных ловушках в работе [14]. В ней приведены решения уравнений магнитной гидродинамики в виде уединенных тороидальных вихрей. Интерес к изучению тороидальных вихрей возрос в связи с разработкой мощных плазмодинамических ловушек, в которых гидродинамическое движение тесно связано с вихревым магнитным полем. Среди таких устройств выделяется «СМОЛА» — спиральная магнитная открытая ловушка, созданная в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН [15].

В работе [14] отмечалось, что уединенные магнитогидродинамические вихри могут встречаться на разных пространственных масштабах, например, в солнечном ветре, который из-за больших размеров является удобным объектом для наблюдения альфвеновских волн. Показано, что турбулентность

Альфвена может состоять из структур в виде тороидальных солитонов, бегущих вдоль магнитного поля со скоростью Альфвена. Возмущения магнитного поля и возмущения скорости параллельны друг другу, как в волне Альфвена. Поэтому такие вихри (солитоны) можно назвать альфвеновскими. При этом плазма является несжимаемой [14].

В работе [16] представлены результаты измерения выхода протонов и дейтронов МэВ-го диапазона энергий при облучении тонких мишеней пикосекундным лазерным импульсом. Пиковая интенсивность лазерного импульса на мишени составила около $4 \cdot 10^{18}$ Вт/см². Обнаружена кольцевая структура вылетающих ионов и малая угловая расходимость ионного пучка (0.5°). Показано, что кольцеобразная структура ионов формируется на тыльной стороне фольги. В работе [17] на основании трехмерного PIC-моделирования делается аналогичный вывод. Подробное объяснение кольцеобразной структуры вылетающих ионов в этих работах отсутствует.

В работе [18] на лазерной установке при мощности излучения 10 ТВт и интенсивности порядка $(2-5) \cdot 10^{18}$ Вт/см² моделировалось формирование и развитие астрофизических релятивистских токовых струй. При энергиях протонов в диапазоне 0.8–1.7 МэВ четко различимы кольцевые структуры протонных пучков. Сравнение результатов лабораторного и численного экспериментов, проведенное в работе [19], а также результаты работы [20] подтверждают возможность образования кольцевых структур в магнитных полях лазерной плазмы, характеристики которых зависят от величины магнитного поля.

В работе [21] представлены результаты исследований потоков плазмы, генерируемых в установке плазменного фокуса PF-1000U. Найдены режимы, предполагающие образование компактных плазменных объектов, распространяющихся в фоновой среде с переменной плотностью на расстояния, в десятки раз превышающие начальные поперечные размеры этих объектов. Показано, что поток распространяется с собственным захваченным тороидальным магнитным полем.

Кольцевая структура протонных пучков, образованных в магнитных полях лазерной плазмы, исследовалась также в работах [20, 22–24]. В работе [24] приводятся результаты численного моделирования трехмерной пространственной структуры магнитных полей, генерируемых на передней и задней поверхностях мишени, которая облучается высокоинтенсивным лазерным излучением. На задней по-

верхности мишени магнитное поле оказалось сильнее, чем на передней. При интенсивности лазерного импульса порядка 10^{19} Вт/см² величина магнитного поля равна соответственно 500 МГс и 100 МГс. Имеет место тороидальная структура таких полей и ориентация ее по нормали к поверхности мишени. Наличие такой структуры определяет характер действия ее магнитного поля на протоны. Протоны под действием такого магнитного поля формируются в замкнутые структуры, а тороидальный характер магнитного поля препятствует их ускорению по нормали к мишени.

В работе [25] экспериментально наблюдался фотонный тороидальный вихрь. Он подобен кольцам сигаретного дыма. Найдено решение уравнения Максвелла, которое описывает тороидальный вихрь.

В настоящей работе рассматриваются плазменные процессы в магнитных полях лазерной релятивистской плазмы, образованной воздействием на твердую мишень лазерного излучения релятивистской (более $3 \cdot 10^{18}$ Вт/см²) интенсивности.

Работа является продолжением недавно опубликованной статьи [26], в которой представлены экспериментальные и теоретические результаты исследования распространения пучков протонов на лазерной установке «Неодим». В этой статье исследовалась кольцевая структура сечения пучка, расходимость и энергия протонов, возникающих с тыльной стороны тонкой мишени из меди, облучаемой лазерными импульсами с пиковой интенсивностью порядка $5.7 \cdot 10^{18}$ Вт/см². При энергии протонов 2.9 МэВ зарегистрирована предельно узкая расходимость протонного пучка, равная 0.05° . Результаты теоретического объяснения на основе модели магнитного пересоединения Свита–Паркера [1] в тонком токовом слое дали хорошее согласие с результатами проведенных экспериментов. Это позволило сделать вывод о реализации в лабораторных условиях процесса магнитного пересоединения.

Модель магнитного пересоединения Свита–Паркера рассматривает процессы переноса массы и энергии в нейтральном токовом слое — слое в плазме, разделяющем плазменные области с противоположно направленными магнитными полями. Токовые слои образуются на разных пространственных масштабах как результат взаимодействия потока плазмы с магнитным полем в условиях преобладания магнитного давления над кинетическим [1]. В этих условиях при большом магнитном числе Рейнольдса происходит «сгребание» плазмы в замороженный в нее магнитным полем. Взаимодействие пото-

ка плазмы с магнитным полем за счет действия силы Лоренца вносит свой вклад в формирование тонкого токового слоя. В окрестности оси токового слоя электромагнитные силы $[\mathbf{j}, \mathbf{B}]$ стремятся сжать конфигурацию поля. Сжатие конфигурации поля происходит при условии сохранения потока индукции магнитного поля, роста напряженности и давления магнитного поля. Магнитогидродинамическое равновесие может установиться, когда магнитное давление будет уравновешено плазменным давлением. Однако в случае, если в начальный момент плазменное давление мало, равновесие может установиться, когда произойдет достаточное скопление плазмы вблизи оси токового слоя и, как следствие этого, повышение плазменного давления. Избыточное давление выдавливает плазму по краям токового слоя. Основные уравнения модели Свита – Паркера, описывающие этот процесс, включают уравнение для магнитной индукции, закон Ома для стационарного случая и закон сохранения массы — поток поступления массы внутрь слоя должен быть равен потоку истечения на обоих концах [1, 26]. Модель Свита – Паркера предсказывает, что из тонкого слоя шириной много меньше его длины плазма выбрасывается с альфвеновской скоростью, определяемой внешним магнитным полем и начальной плотностью плазмы.

Помимо знаний о пространственном сечении пучка протонов, их энергии и расходимости, интерес представляют такие характеристики, как пространственная структура потока частиц и связанного с ним магнитного поля.

2. РАВНОВЕСНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ ЛАЗЕРНОЙ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ПЛАЗМЫ

Рассмотрим появление равновесных плазменных образований в тонкой токовой струе, возникающей в результате магнитного пересоединения в условиях эксперимента работы [26]. Скорость протонного потока в токовой струе равна альфвеновской скорости втекания плазмы в узкий токовый (диффузионный) слой, в котором и происходит процесс перезамыкания магнитных линий. Выберем систему координат, движущуюся с этой скоростью. Протоны в этой системе координат неподвижны, а уравнения Максвелла не меняют своего вида вследствие их лоренцевой инвариантности [2]. Задача сводится к нахождению равновесных конфигураций в неподвижной плазме. Решение такой задачи приведено в [27]. Следуя этому решению, рассмотрим процесс фор-

мирования равновесных плазменных образований в тонкой токовой струе, возникающей в результате пересоединения в магнитных полях лазерной плазмы. Рассмотрим пространственную, токовую и магнитную структуры таких плазменных образований.

Равновесие плазмы (как идеально проводящей жидкости) описывается тремя уравнениями. Первое представляет собой уравнение Эйлера для покоящейся плазмы:

$$\nabla P = \frac{1}{c} [\mathbf{j}, \mathbf{H}] \quad (1)$$

(P — давление), а два других — это уравнения Максвелла для магнитного поля:

$$\mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} \text{rot } \mathbf{H}, \quad (2)$$

$$\text{div } \mathbf{H} = 0. \quad (3)$$

Общее представление о пространственной структуре равновесной плазменной конфигурации можно получить из уравнения (1), умножив его скалярно на $\mathbf{H}$ и на $\mathbf{j}$:

$$(\mathbf{H} \nabla) P = 0, \quad (\mathbf{j} \nabla) P = 0. \quad (4)$$

Отсюда следует равенство нулю производных давления P вдоль магнитных силовых линий и вдоль линий тока. Это означает, что магнитные силовые линии, как и линии тока, лежат на поверхностях постоянного давления

$$P(\mathbf{r}) = \text{const}, \quad (5)$$

которые называются магнитными поверхностями. На магнитных поверхностях, определяемых (1) и условием равновесия (5), реализуется область бессилового магнитного поля:

$$[\mathbf{j}, \mathbf{H}] = 0. \quad (6)$$

Справедливо и более общее утверждение — равновесное поле должно быть бессильным.

Исходная рассматриваемая конфигурация — это неограниченно длинный цилиндрический плазменный шнур, однородный вдоль своей оси. Используется цилиндрическая система координат (r, φ, z) с осью z вдоль оси шнура. Все величины в нем зависят только от радиальной координаты r . В цилиндрической системе координат магнитное поле, которое всюду перпендикулярно плоскостям, проходящим через ось (меридиональным плоскостям), называется тороидальным, а магнитное поле, силовые линии которого лежат всюду в меридиональных плоскостях, называется полоидальным.

Уравнения (1)–(3) могут быть выражены через компоненты в цилиндрической системе координат:

$$j_\varphi H_z - j_z H_\varphi = c \frac{\partial P}{\partial r}, \quad (7)$$

$$j_r H_\varphi - j_\varphi H_r = c \frac{\partial P}{\partial z}, \quad j_r H_z - j_z H_r = 0;$$

$$j_r = \frac{c}{4\pi} \frac{\partial H_\varphi}{\partial z}, \quad j_z = \frac{c}{4\pi r} \frac{\partial(r H_\varphi)}{\partial r}, \quad (8)$$

$$j_\varphi = \frac{c}{4\pi} \left(\frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r} \right);$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r H_r)}{\partial r} + \frac{\partial H_z}{\partial z} = 0. \quad (9)$$

Система уравнений (7)–(9) сводится к одному уравнению введением магнитного потока и полного тока через круг радиуса r , перпендикулярный оси z :

$$\psi(r, z) = 2\pi \int_0^r H_z(r', z) r' dr', \quad (10)$$

$$J(r, z) = 2\pi \int_0^r j_z(r', z) r' dr'.$$

Такой подход, предложенный Шафрановым [28], позволяет свести задачу к решению одного уравнения, содержащего только ψ . Используя эти переменные и равенства $\operatorname{div} \mathbf{H} = 0$ и $\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$, полоидальные компоненты поля и плотности тока можно записать в виде

$$H_r = -\frac{1}{2\pi r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad H_z = \frac{1}{2\pi r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad (11)$$

$$j_r = -\frac{1}{2\pi r} \frac{\partial J}{\partial z}, \quad j_z = \frac{1}{2\pi r} \frac{\partial J}{\partial r}. \quad (12)$$

Отсюда следует, что градиенты переменных $\psi(r, z)$ и $J(r, z)$ ортогональны соответственно магнитной силовой линии и линии тока. Поскольку магнитные силовые линии, так же как и линии тока, лежат на поверхностях постоянного давления (5), ψ и J постоянны на этих магнитных поверхностях. Следовательно, J и P можно выразить в виде функции от ψ :

$$J = J(\psi), \quad P = P(\psi). \quad (13)$$

Тороидальные компоненты магнитного поля и тока выражаются через J и ψ с учетом уравнений (8):

$$H = \frac{2J}{cr}, \quad j_\varphi = -\frac{1}{8\pi^2 r} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right). \quad (14)$$

Подстановка полученных полоидальных (11), (12) и тороидальных (14) компонент магнитного поля и тока в уравнение (7) приводит к уравнению Грэда – Шафранова для переменных J и ψ :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -16\pi^3 r^2 \frac{dP}{d\psi} \frac{8\pi^2}{c^2} \frac{d(J^2)}{d\psi}. \quad (15)$$

Это уравнение широко используется для описания статического равновесия в термоядерных установках с магнитным удержанием, в которых реализация управляемого термоядерного синтеза (УТС) рассматривается как квазистационарный процесс; оно применимо ко многим астрофизическим плазменным процессам [29, 30]. Уравнение Грэда – Шафранова описывает равновесные конфигурации плазмы в двухжидкостной плазмостатике; оно является основой теории равновесия плазмы в осесимметричных магнитных конфигурациях [14, 31, 32].

Задавая конкретную (достаточно произвольно выбранную) зависимость и решая это уравнение, получим равновесную конфигурацию, в которой распределения магнитного поля и токов определяются выражениями (11), (12) и (14), а магнитные поверхности даются равенствами $\psi(r, z) = \text{const}$. В [27] показано, что простым решением уравнения (15) при

$$16 \frac{dP}{d\psi} = \text{const} = -a\psi_0, \quad (16)$$

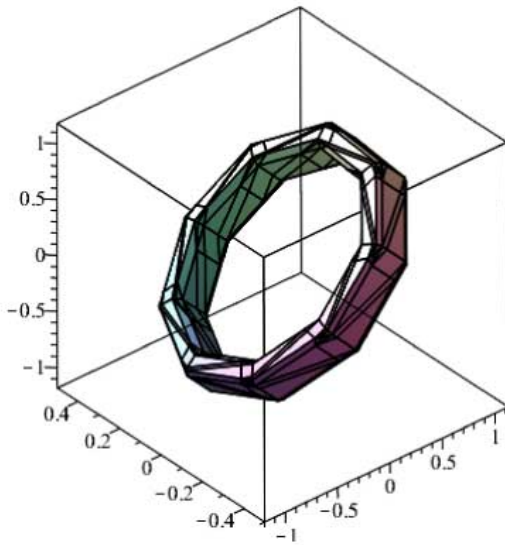
$$\frac{8\pi^2}{c^2} \frac{dJ^2}{d\psi} = \text{const} = -bR^2\psi_0$$

будет выражение, описывающее равновесную конфигурацию, в которой распределения магнитного поля и токов определяются выражениями (11), (12) и (14), а магнитные поверхности даются равенствами $\psi(r, z) = \text{const}$:

$$\frac{\psi(r, z)}{\psi_0} = \frac{1}{2}(bR^2 + r^2)z^2 + \frac{a-1}{8}(r^2 - R^2)^2. \quad (17)$$

Здесь a, b, R и ψ_0 — постоянные величины. Величина R представляет собой радиус типичных колец и согласно нашей работе [26] оценивается примерно как 15 мкм. В соответствии с (16) безразмерная константа b определяется полным током J , а безразмерная константа a определяется магнитным давлением P . Точные значения этих констант в токовой струе на основе (16) найти затруднительно. В стандартных тороидальных конфигурациях они порядка единицы, как видно из приведенных ниже рисунков. Это решение описывает тороидальную конфигурацию, состоящую из вложенных друг в друга тороидальных магнитных поверхностей $\psi(r, z) = \text{const}$ — каждая из них может быть принята за границу плазмы, т. е. $P = 0$. Конфигурации в торе при любом сечении могут обладать только осевой симметрией, т. е. все они двумерны.

Рассмотрим сечения магнитных поверхностей в цилиндрической системе координат, описываемые

Рис. 1. $A = 0.01$

уравнением (17), для типичных значений $a = 2$, $b = 1$:

$$8\psi/\psi_0 = 4(R^2 + r^2)z^2 + (r^2 - R^2)^2 = \text{const.} \quad (18)$$

Заменяя $z \rightarrow z/r$, $r \rightarrow r/R$, упрощаем (18), приводя его к однопараметрическому виду, зависящему от одного параметра A :

$$8A = \frac{8\psi}{R^4\psi_0} = 4(1 + r^2)z^2 + (r^2 - 1)^2 = \text{const.} \quad (19)$$

Параметр A характеризует магнитный поток через площадь, перпендикулярную к оси z .

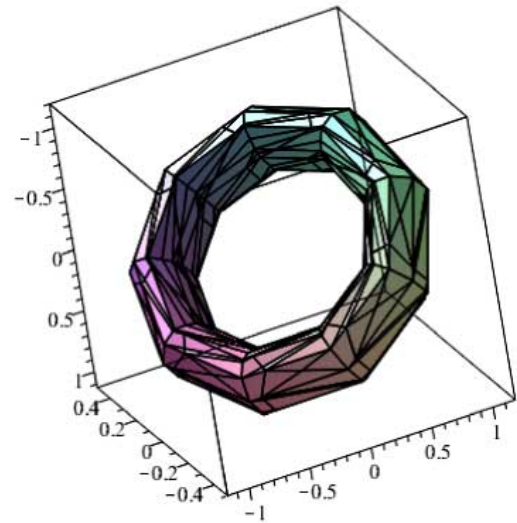
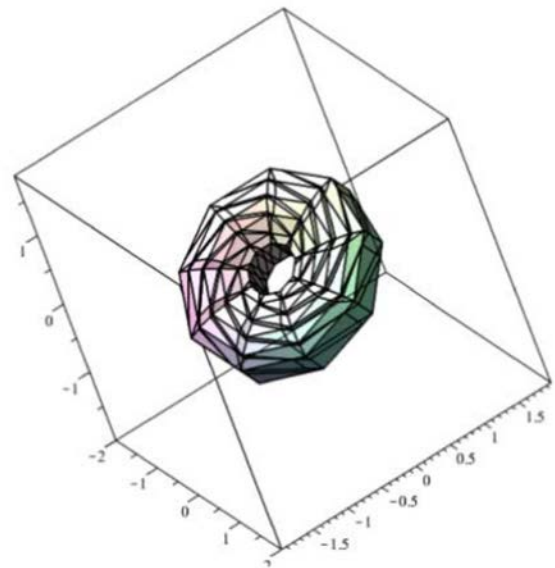
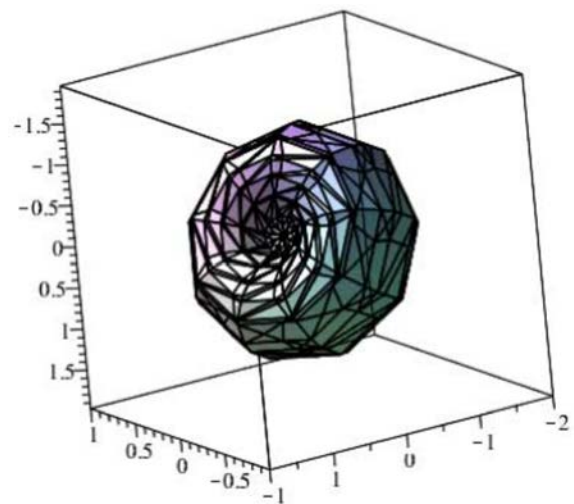
При $\psi/\psi_0 = 0$ из (19) имеем $z = 0$, $r = 1$. Это окружность нулевой толщины. При $A \ll 1$ из (19) получаем

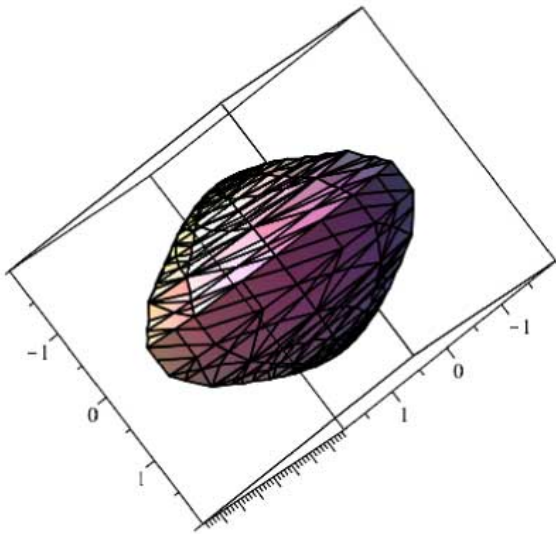
$$2A = 2z^2 + (r - 1)^2. \quad (20)$$

График (20) показан на рис.1 для $A = 0.01$. Это эллипс — сечение магнитной поверхности. А в пространстве мы получаем тонкую «баранку». Ее ось направлена вдоль магнитного потока.

Постепенно увеличиваем магнитное поле. На рис. 2 представлено решение уравнения (19) для $A = 0.025$. При этом видно, как «бублик» становится толще.

На рис. 3 представлено решение уравнения (19) для еще большего значения $A = 0.125$. В этом случае «дырка» в «бублике» становится малой. На рис. 4 представлено решение уравнения (19) для $A = 0.150$. При этом уже нет вообще «дырки» в «бублике». Наконец, на рис. 5 показано решение уравнения (19) для большого значения $A = 1$. Поверхность постепенно принимает форму «блина» с осью вдоль магнитного потока.

Рис. 2. $A = 0.025$ Рис. 3. $A = 0.125$ Рис. 4. $A = 0.150$

Рис. 5. $A = 1$

Рассмотрим структуру магнитных силовых линий и линий тока на магнитных поверхностях, определяемых уравнением (1) и условием равновесия (5), на которых реализуется область бессилового магнитного поля. Из уравнения (1) с учетом, что все величины зависят только от радиальной координаты r , получим

$$\frac{dP}{dr} = \frac{1}{c}(j_\varphi H_z - j_z H_\varphi). \quad (21)$$

Для бессилового поля давление $P = \text{const}$. Из (21) следует

$$j_\varphi H_z = j_z H_\varphi. \quad (22)$$

Это приводит к спиральному магнитному полю, изображенному на рис. 6 [7].

Рассмотренная структура бессилового магнитного поля относится к модели бесконечно протяженного цилиндра. В работе [9] показано, что спиральный характер магнитного поля сохраняется при строгом рассмотрении тороидальных моделей магнитного поля с винтовой структурой. Свойства магнитного поля соответствуют аналогичным свойствам поля в цилиндрической модели. Напряженность поля максимальна на магнитной оси тора. На поверхности каждого цилиндра, как и на вложенных друг в друга тороидальных поверхностях, располагаются винтовые магнитные силовые линии со своим шагом винта [9]. Устойчивость таких тороидальных плазменных структур с винтовым магнитным полем изучалась в связи с перспективой их использования для удержания высокотемпературной плазмы, в частности, в системах типа стелларатор со стабилизирующими винтовыми обмотками [33]. Показано, что плазма с достаточно малым давлением по сравнению с магнитным давлением ($P \ll H^2/8\pi$) будет

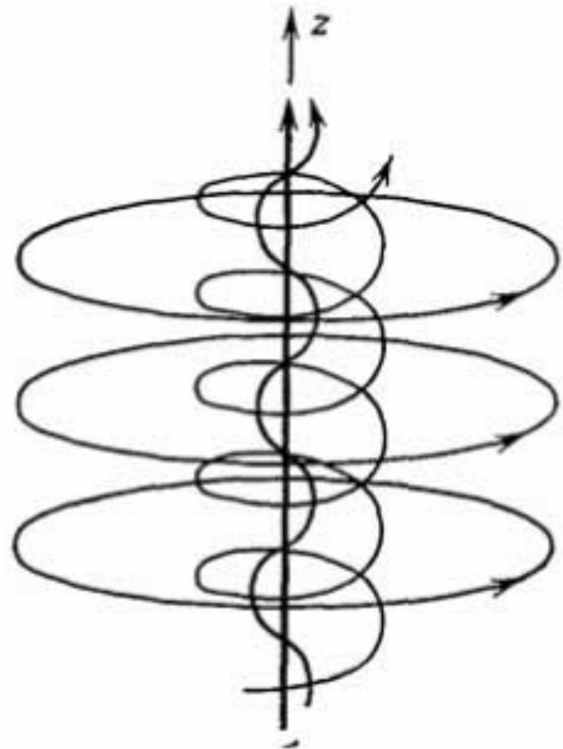


Рис. 6. Структура спиральных магнитных силовых линий и линий тока в области бессилового магнитного поля

устойчива в таком «перекрученном» магнитном поле [33].

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ ТОКОВЫХ СТРУЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ ТОРОИДАЛЬНЫХ СТРУКТУР ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

На основе описанных тороидальных плазменных структур, возникающих в магнитных полях лазерной плазмы, и общего характера исходных для них уравнений (1)–(3) может быть предложена модель астрофизических токовых струй, состоящая из дискретной последовательности тороидальных равновесных плазменных структур. Схематично такая модель показана на рис. 7, на нем изображен аккреционный диск, из центра которого излучается астрофизическая токовая струя.

Такая модель была предложена в работе [18] на основе качественного рассмотрения полной идентичности уравнений для магнитного поля в лазерной плазме и уравнений для реальных потенциальных вихрей в механике сплошных сред, которые соответствуют трем теоремам Гельмгольца [34]. Кольцевая структура, фиксируемая на плоскости детектора заряженных частиц, отражает сечение плаз-

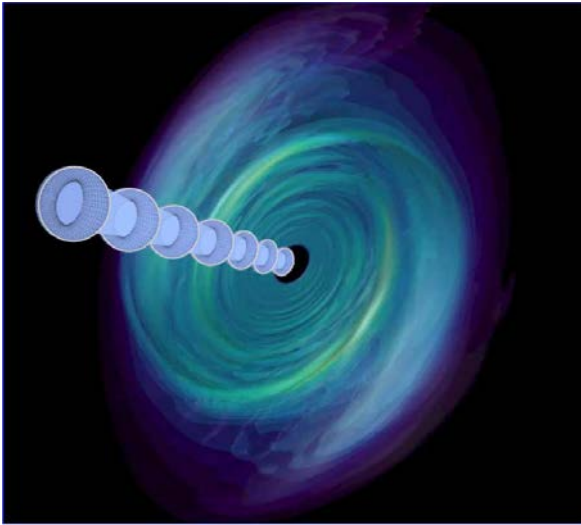


Рис. 7. Модель астрофизической токовой струи, состоящая из дискретной последовательности тороидальных равновесных плазменных структур

менной структуры, падающей на эту плоскость, которая возникает в лазерной плазме и распространяется в пространстве.

Лазерная плазма, инициируемая одиночным лазерным импульсом, генерирует одиночную тороидальную равновесную плазменную структуру (в работе [18] она была названа альфвеновским солитонном). Термин «альфвеновский солитон» был впервые введен в работе [35], он был использован при описании плазменных структур в виде тороидальных солитонов, бегущих вдоль магнитного поля со скоростью Альфвена [14].

В случае наличия мощного источника энергии в условиях сильного магнитного поля может реализоваться автоколебательный режим, приводящий к последовательности таких солитонов, следующих друг за другом. Как известно, автоколебаниями называются вынужденные незатухающие колебания в реальных системах, период и амплитуда которых не зависят от характера внешнего воздействия, а определяются свойствами самой автоколебательной системы. Автоколебания в реальных системах могут продолжаться сколь угодно долго, пока не израсходуется энергия источника, поддерживающего эти колебания. Подтверждением генерации релятивистских токовых струй в режиме автоколебаний может быть снятая с высоким разрешением дискретная структура токовой струи [6].

Быстрота процесса магнитного пересоединения и его высокая эффективность на сильно отличающихся пространственных масштабах обуславливают постоянно растущий интерес к этому направлению

физики плазмы. Естественно определить эффективность процесса как отношение разности магнитных энергий до и после пересоединения к кинетической и внутренней энергии плазмы, сосредоточенной в ускоренных струях. В нерелятивистском случае эффективность пересоединения примерно равна $1/2$, т. е. половина магнитной энергии расходуется на ускорение плазмы, а вторая теряется в виде возмущений в окружающем пространстве; релятивистское пересоединение обладает максимальной эффективностью, приближающейся к единице [36]. Учет релятивистских эффектов становится существенным в том случае, когда плотность магнитной энергии сравнима с плотностью полной энергии среды, включая энергию покоя [37]:

$$B^2/8\pi \geq \rho c^2. \quad (23)$$

Условие (19) в системе СГС может быть записано в виде

$$B \geq 1.5 \cdot 10^{11} \sqrt{\rho}, \quad (24)$$

где B выражено в Гс, ρ — в г/см³. Выполнение этого условия в лазерной плазме твердотельной плотности ($n \geq 10^{23}$ см⁻³, $\rho \geq 1$ г/см³) требует напряженности магнитного поля $B \geq 10^{11}$ Гс и соответствующей интенсивности лазерного излучения $J \geq 10^{24}$ Вт/см² [38], недостижимой на современных лазерных установках. Однако условие (24) достижимо в вакуумной камере при давлении 10^{-3} мм рт. ст. (плотность 10^{-9} г/см³) в условиях наших экспериментов по магнитному пересоединению [26]. Генерация магнитного поля происходит в скин-слое плотной лазерной плазмы, а пересоединение — в разреженной среде с тыльной стороны лазерной мишени.

Достижение режима релятивистского пересоединения, обладающего максимальной эффективностью, равной единице, становится возможным в магнитных полях лазерной плазмы за счет такого разделения физических процессов, протекающих в средах, которые сильно различаются по плотности. Главной особенностью «твердотельной» лазерной плазмы является генерация в ней сверхсильных магнитных полей свыше 100 МГс [39]. Сверхсильное магнитное поле, создаваемое ускоренными электронами лазерной плазмы [38], обеспечивает уникальные условия для исследования аннигиляции и эффективного пересоединения магнитного поля в области выполнения условия (23), которая не совпадает с областью генерации магнитного поля. Здесь видна аналогия с Солнцем, когда генерация магнитного поля происходит в плотной среде конвективной зоны, а пересоединение — в разреженных средах фотосферы, хромосферы и даже в солнечной короне.

Аналогичная ситуация реализуется, по-видимому, в процессах образования космических токовых струй. За счет разных законов изменения магнитного поля и плотности в зависимости от расстояния существует протяженная в пространстве область выполнения условия (23), т.е. область релятивистского пересоединения, которая обладает максимальной эффективностью, равной единице.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построение модели пространственной структуры космических токовых струй с объяснением их устойчивого распространения с малой расходимостью является важной актуальной задачей многоплановой и сложной проблемы построения модели физических процессов возникновения и трансформации космических токовых струй. Отсутствие в настоящее время общепринятой точки зрения на механизм формирования токовых струй обуславливает особую актуальность их моделирования в лабораторной плазме. Использование сверхмощных лазеров ультракороткой длительности (0.1–1 пс) с возможностью получения интенсивности лазерного излучения на мишени в диапазоне (10^{18} – 10^{22}) Вт/см² позволяет проводить эксперименты по лабораторной астрофизике в релятивистском режиме, недоступном ранее для лазеров с наносекундной длительностью импульса. Это открывает новые возможности для понимания релятивистских режимов быстрой диссипации магнитного поля, особенно в космической плазме, где энергия крупномасштабного магнитного поля преобразуется в энергию заряженных частиц.

Сильно различающиеся пространственные масштабы лазерной плазмы и космической токовой струи (микроны и парсеки) позволяют тем не менее корректно масштабировать токовые струи плазменными потоками, возникающими в магнитных полях лазерной плазмы в случае, если и те, и другие подчиняются законам идеальной магнитной гидродинамики. Уравнения магнитной гидродинамики не имеют собственного масштаба, и поэтому они могут описывать как лабораторные, так и астрофизические течения [4].

В настоящей работе теоретически исследовалась пространственная структура плазменных потоков, моделирующих астрофизические токовые струи в магнитных полях лазерной плазмы. Экспериментально такая пространственная структура, расходимость и энергия пучков протонов, возникающих с тыльной стороны тонкой мишени из меди, облущае-

мой лазерными импульсами с пиковой интенсивностью порядка $5 \cdot 10^{18}$ Вт/см², исследовались в нашей работе [26]. При энергии протонов 2.9 МэВ была зарегистрирована кольцевая форма сечения и предельно узкая расходимость протонного пучка, равная 0.05° . Для теоретического объяснения полученных экспериментальных данных использована модель Свита – Паркера пересоединения магнитных силовых линий [1]. Основные результаты настоящей работы сводятся к следующему.

- Рассмотрено образование равновесных плазменных образований в тонкой токовой струе, возникающей в результате магнитного пересоединения в условиях эксперимента работы [26]. В этой работе показано, что скорость протонного потока в токовой струе равна альфвеновской скорости втекания плазмы в узкий токовый (диффузионный) слой, в котором и происходит процесс перезамыкания магнитных линий. Выбрана система координат, движущаяся с этой скоростью. Протоны в этой системе координат неподвижны, уравнения Максвелла не меняют своего вида вследствие их лоренцевой инвариантности [2] и задача сводится к нахождению равновесных конфигураций в неподвижной плазме. Решение этой задачи построено на результатах работы [27], на основе которой рассмотрены пространственная, токовая, магнитная структуры равновесных плазменных образований, возникающих в магнитных полях лазерной плазмы. Показано, что полученное решение описывает тороидальные плазменные структуры с винтовым магнитным полем. Решение задачи сведено к решению уравнения Грэда – Шафранова, описывающего равновесие плазмы в токамаке, как метод исследования магнитосфер компактных астрофизических объектов. Уравнение Грэда – Шафранова описывает осесимметричные стационарные течения, которые являются очень распространенным явлением природы. К ним относятся струйные выбросы из молодых звездных объектов и релятивистские токовые струи из центров активных галактических ядер и других астрономических объектов [30].
- Показано, что наблюдаемая в сечении плазменного потока кольцевая структура является аналогом тороидальной равновесной плазменной конфигурации, возникающей в сильных магнитных полях лазерной плазмы. До насто-

ящего времени не существует общепризнанной теории образования кольцевых структур потоков протонов, генерируемых при взаимодействии мощного лазерного излучения с веществом. Полученные результаты могут быть рассмотрены как вклад в развитие теории образования кольцевых структур потоков протонов, образованных в магнитных полях лазерной плазмы.

- Рассмотрены условия и возможность в магнитных полях лазерной плазмы режима релятивистского пересоединения с максимальной эффективностью, когда отношение разности магнитных энергий до и после пересоединения к кинетической энергии плазмы, сосредоточенной в ускоренных струях, равно единице. Реализация этого режима связана с учетом релятивистских эффектов, которые становятся существенными в том случае, когда плотность магнитной энергии сравнима с плотностью полной энергии среды, включая энергию покоя. Выполнение этого условия в лазерной плазме твердотельной плотности требует напряженности магнитного поля, которая может теоретически быть реализована при интенсивности лазерного излучения, недоступной на современных лазерных установках. Однако это условие достижимо в вакуумной камере вблизи мишени в области существования достаточно сильного магнитного поля. Достижение режима релятивистского пересоединения, обладающего максимальной эффективностью, равной единице, становится возможным в магнитных полях лазерной плазмы за счет такого разделения физических процессов, протекающих в средах, сильно различающихся по плотности. Аналогичная ситуация реализуется на Солнце, когда генерация магнитного поля происходит в плотной среде конвективной зоны, а пересоединение имеет место в разреженных средах фотосферы, хромосферы и даже в солнечной короне. Аналогичный режим релятивистского пересоединения может реализоваться в процессах образования космических токовых струй. За счет разных законов изменения магнитного поля и плотности в зависимости от расстояния должна существовать протяженная в пространстве область выполнения условия режима релятивистского пересоединения, обладающего максимальной эффективностью трансформации энергии магнитного поля в кинетическую энергию заряженных частиц.

- Построена модель астрофизических токовых струй, состоящая из дискретной последовательности тороидальных равновесных плазменных структур, подобных возникающим в магнитных полях лазерной плазмы. Кольцевая структура, фиксируемая на плоскости детектора заряженных частиц, отражает сечение плазменной структуры, падающей на эту плоскость, которая возникает в лазерной плазме и распространяется в пространстве. Лазерная плазма, инициируемая одиночным лазерным импульсом, генерирует одиночную тороидальную равновесную плазменную структуру, которая может быть рассмотрена как альфвеновский солитон. В случае наличия мощного источника энергии в условиях сильного магнитного поля может реализоваться автоколебательный режим, приводящий к последовательности таких солитонов, следующих друг за другом. Образования солитонного типа в структуре космических токовых струй объясняют их устойчивость и распространение на большие расстояния с малой расходимостью.

Необходимо отметить интенсивность и плодотворность работ по моделированию космических токовых струй, проводимых в последнее время на установках плазменного фокуса. Полученные здесь результаты экспериментов стимулировали развитие теоретических моделей. В работе [40] найден новый класс решений уравнения Грэда – Шафранова, описывающий замкнутые стационарные течения, в частности, тороидальный замагниченный плазменный выброс, движущийся в покоящейся среде. На этой основе определена внутренняя структура плазменного выброса, наблюдаемого при лабораторном моделировании нерелятивистских токовых струй на установке плазменного фокуса НИЦ «Курчатовский институт». Показано, что в структуре плазменного выброса возникает вращение плазмы [9, 40]. Найдены и исследованы режимы с генерацией компактных устойчивых плазменных образований, распространяющихся на большие расстояния [41, 42]. Показано, что магнитное поле играет существенную роль в коллимации плазменного потока. Измерения магнитных полей с пространственным разрешением вдоль оси пролетной камеры позволили определить протяженность области с захваченным магнитным потоком и показать, что плазменный поток распространяется с собственным захваченным магнитным полем [43].

Развитие физических методов и средств формирования природоподобных плазменных потоков

в условиях сильных магнитных полей, предоставило принципиально новые возможности в моделировании космических токовых струй. Эти возможности хорошо реализуются на современных установках плазменного фокуса и на лазерных установках высокоинтенсивного излучения. Результаты, полученные на этих установках, хорошо дополняют друг друга, вносят свой вклад в построение модели сложного уникального явления космических токовых струй. Результаты этих исследований носят общий фундаментальный характер, их применение перспективно не только в космической и астрофизической плазме, но и при создании инновационных природоподобных технологий в области магнитоплазодинамических двигателей космических аппаратов, а также в области термоядерной плазмы [44].

Финансирование. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 18-29-21021 мк). За организацию и проведение полезных дискуссий по теме исследований авторы выражают благодарность программе 10 «Экспериментальная Лабораторная Астрофизика и Геофизика» НЦФМ. Работа поддержана также Министерством науки и высшего образования РФ (№ FSMG-2021-0005).

ЛИТЕРАТУРА

1. Э. Прист, Т. Форбс, *Магнитное пересоединение: магнитогидродинамическая теория и приложения*, Физматлит, Москва (2005).
2. A. Bykov et al., *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **292**, 1 (1997).
3. А. А. Быков, В. Ю. Попов, *Вестник МГУ, сер. 3, физика, астрономия* № 5, 7 (1999).
4. В. С. Бескин, И. Ю. Калашников, *Письма в астроном. ж.* **46**, 494 (2020).
5. A. Chrysostomou, P. W. Lucas, and J. H. Hough, *Nature* **450**, 71 (2007).
6. E. C. Hansen, A. Frank, P. Hartigan, and S. V. Lebedev, *Astrophys. J.* **837**, 143 (2017).
7. <https://astronews.ru/cgi-bin/mng.cgi?page=news&news=20211208052023>
8. F. Mertens et al., *Astron. Astrophys.* **595**, 54 (2016).
9. В. И. Крауз, К. Н. Митрофанов, А. М. Харрасов, И. В. Ильичев, В. В. Мяслон, С. С. Ананьев, В. С. Бескин, *Астроном. ж.* **98**, 29 (2021).
10. *Физическая энциклопедия*, т. 5, Советская энциклопедия, Москва (1998).
11. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические солитоны*, Физматлит, Москва (2011).
12. А. Б. Борисов, В. В. Киселев, *Нелинейные волны, солитоны и локализованные структуры в магнетиках*, т. 2, *Топологические солитоны, двумерные и трехмерные «узоры»*, УрО РАН, Екатеринбург (2011).
13. Г. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах: от диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации*, Мир, Москва (1979).
14. В. И. Петвиашвили, О. А. Похотелов, *Уединенные волны в плазме и атмосфере*, Энергоатомиздат, Москва (1989).
15. А. В. Аржанников, А. Д. Беклемишев, *Вестник Новосиб. гос. ун-та, сер. физика* **11**, 107 (2016).
16. А. А. Андреев и др., *Письма в ЖЭТФ* **79**, 400 (2004).
17. A. Puchov, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 3562 (2001).
18. V. S. Belyaev, A. P. Matafonov, and B. V. Zagreev, *Int. J. Mod. Phys. D* **27**, 1844002 (2018).
19. В. С. Беляев, Г. С. Бисноватый-Коган, А. И. Громов и др., *Астроном. ж.* **95**, 171 (2018).
20. Y. Murakami et al., *Phys. Plasmas* **8**, 4138 (2001).
21. V. I. Krauz et al., *Eur. Phys. Lett.* **129**, 15003 (2020).
22. K. Krushelnick et al., *Phys. Plasmas* **7**, 2055 (2000).
23. M. Zepf et al., *Phys. Rev. Lett.* **90**, 064801 (2003).
24. M. Nakatsutsumi et al., *Nature Comm.* **9**, 280 (2018).
25. Ch. Wan et al., *Nature Photon.* **16**, 519 (2022), <https://doi.org/10.1038/s41566-022-01013-y>.
26. В. С. Беляев, Б. В. Загребев, А. Ю. Кедров и др., *ЖЭТФ* **160**, 474 (2021).
27. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
28. В. Д. Шафранов, в сб. *Вопросы теории плазмы*, вып. 2, Госатомиздат, Москва (1963), с. 92–131.
29. В. И. Ильгисонис, *Классические задачи горячей плазмы, Курс лекций*, серия «Высшая школа физики», вып. 8, Изд. дом МЭИ, Москва (2015).
30. В. С. Бескин, *УФН* **173**, 1247 (2003).

31. Л. Е. Захаров, В. Д. Шафранов, *Вопросы теории плазмы*, вып. 11, / под ред. М. А. Леонтовича и Б. Б. Кадомцева, Энергоиздат, Москва (1982), с. 118.
32. А. С. Петухова, С. И. Петухов, *Солнечно-земная физика* **5**, 74 (2019).
33. Б. Б. Кадомцев, в сб. *Вопросы теории плазмы*, вып. 2, Госатомиздат, Москва (1963), с. 132–176.
34. Л. И. Седов, *Механика сплошной среды*, т. 2, Наука, Москва (1970).
35. А. Б. Михайловский, В. И. Петвиашвили, А. М. Фридман, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 53 (1976).
36. В. С. Семенов и др., *Вестник СПбГУ*, сер. 4, вып. 2, с. 88 (2007).
37. С. И. Сыроватский, *УФН* **62**, 247 (1957).
38. В. С. Беляев, *КЭ* **34**, 41 (2004).
39. В. С. Беляев, В. П. Крайнов, В. С. Лисица, А. П. Матафонов, *УФН* **178**, 823 (2008).
40. В. С. Бескин, И. Ю. Калашников, *Письма в астрофиз. ж.* **46**, 494 (2020).
41. V. I. Krauz et al., *Plasma Phys.* **86**, 905860607 (2020).
42. V. I. Krauz et al., *Eur. Phys. Lett.* **129**, 15003 (2020).
43. В. И. Крауз и др., *Физика плазмы* **47**, 829 (2021).
44. <https://pulse.mail.ru/article/magnitnoe-peresoedinenie-vpervye-v-laboratorii-6707078346611256767-6460601261263399841/>

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ШАРОВ С ТОЧЕЧНЫМ ЗАРЯДОМ

*М. М. Родин, А. В. Филиппов**

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

*ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
108840, Троицк, Москва, Россия*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 октября 2022 г.,
после переработки 2 ноября 2022 г.
Принята к публикации 4 ноября 2022 г.

Рассмотрена задача о взаимодействии трех заряженных частиц, размером одной из которых можно пренебречь. Методом разложения по шаровым гармоникам найдены уравнения для коэффициентов разложения потенциала электрического поля. Получены выражения для декартовых компонент силы и момента силы взаимодействия. Показано, что несмотря на нарушение аксиальной симметрии при добавлении третьей частицы, при равномерной зарядке частицы сферической формы все компоненты вектора момента силы, действующей на нее, равны нулю. Путем выделения вкладов зарядов-изображений в явном виде получены формулы для поверхностной плотности заряда и силы взаимодействия частиц. Исследованы условия возникновения притяжения между одноименно заряженными сферическими частицами в зависимости от положения точечной.

DOI: 10.31857/S0044451023030033

EDN: QDIKKL

1. ВВЕДЕНИЕ

В природе и технике существует множество примеров, когда в механизме взаимодействия заряженных макроскопических объектов электростатическая сила играет главенствующую роль. К таким системам относятся заряженные пылевые частицы в космосе [1], заряженные аэрозоли в атмосферах планет и спутников [2–4], частицы конденсированной дисперсной фазы в плазме и электролитах [5], частицы порошковых красок [6] и ряд других. В качестве модели чаще всего рассматриваются пары проводящих [7, 8] или диэлектрических шаров [9–11], частицы сфероидальной формы [12, 13], системы, включающие в себя точечные частицы [14] или неограниченные плоскости [15]. Для выбранной геометрии рассчитываются сила и потенциал взаимодействия

заряженных тел, а также распределение связанных зарядов на поверхностях диэлектриков. Это позволяет, в частности, определить условия возникновения притяжения между одноименно заряженными объектами [16], что является существенным для описания эволюции таких систем и объяснения наблюдаемых в эксперименте эффектов [17].

Во многих работах, посвященных теоретическому исследованию взаимодействия двух диэлектрических частиц, поставленная задача решалась в бисферической системе координат (см., например, [7, 9, 16, 18–20]). Известны также результаты расчетов в сферической системе координат методом переразложения [11, 18, 19, 21], методом изображений [18, 19] и численные решения методом конечных элементов Галеркина [6]. В последние годы начаты исследования электростатического взаимодействия многих сферических частиц методом интегральных уравнений [22–25].

В настоящей работе исследуется влияние соседних частиц на взаимодействие пары заряженных диэлектрических частиц. В сферической системе координат рассматривается система из трех частиц,

* E-mail: fav@triniti.ru

одна из которых для упрощения задачи полагается точечной (неполяризуемой). Это означает, что распределение связанных зарядов на поверхностях частиц конечного размера возмущено присутствием третьей частицы, но перераспределением заряда на поверхности самой этой частицы можно пренебречь, т.е. самосогласованное перераспределение плотности заряда затрагивает только две частицы из трех. Эта упрощенная модель приводит, однако, к существенным вычислительным трудностям, связанным с крайне медленной сходимостью рядов для электростатического потенциала вблизи поверхностей сферических частиц при малых межчастичных расстояниях. В данной работе предлагается метод преодоления этих трудностей на основе аналитических преобразований рядов, входящих в выражение для электростатического потенциала.

2. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В СФЕРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

2.1. Электростатический потенциал системы

Введем сферическую систему координат (r, θ, φ) с началом в центре первого диэлектрического шара радиусом a_1 , полярную ось z направим к центру второго шара (его радиус a_2 , расстояние между центрами шаров R), а плоскость xz , соответствующую нулю азимутального угла φ , проведем через третью точечную частицу (см. рис. 1). На рисунке точка наблюдения P определена также через координаты $(r_2, \theta_2, \varphi_2)$, связанные со вторым шаром (в дальнейшем введенные системы координат будем для краткости обозначать соответственно СК1 и СК2); отметим, что СК2 получена из СК1 сдвигом вдоль оси z без изменения ориентации осей, поэтому $\varphi = \varphi_2$. Полные заряды частиц обозначим q_1 , q_2 и q_0 ; последняя, точечная, частица имеет координаты $(r_{01}, \theta_0, \varphi = 0)$ в СК1 и $(r_{02}, \theta_{02}, \varphi = 0)$ в СК2. Положение точки наблюдения P относительно точечной частицы определяется вектором $\mathbf{r}_0$, который из центра первого шара виден под углом γ .

Для определения электростатического потенциала системы воспользуемся методом разложения потенциалов сферических частиц по шаровым функциям в собственных системах координат с последующим переразложением для удобства подстановки в граничные условия. Данный метод использовался, например, в работах [11, 16], в которых решалась аксиально-симметричная задача. В рассматриваемой нами геометрии имеет место симметрия относительно плоскости xz ,

поэтому для разложения достаточно использовать четные по азимутальному углу функции $r^{-n-1}P_n^m(\cos\theta)\cos m\varphi$ и $r^n P_n^m(\cos\theta)\cos m\varphi$. Обозначив $\mu = \cos\theta$ и $\mu_2 = \cos\theta_2$, запишем представление потенциала внутри диэлектрических частиц:

$$\begin{aligned}\phi_I(r, \mu, \varphi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \alpha_{1,n}^m r^n P_n^m(\mu) \cos m\varphi, \\ \phi_{II}(r_2, \mu_2, \varphi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \alpha_{2,n}^m r_2^n P_n^m(\mu_2) \cos m\varphi,\end{aligned}\quad (1)$$

где $\alpha_{1,n}^m$, $\alpha_{2,n}^m$ — коэффициенты разложения. Здесь учтено, что в центрах сферических частиц потенциал должен быть конечным. Аналогично, в силу обращения в нуль на бесконечности, разложение потенциала каждой из частиц во внешнем пространстве имеет вид

$$\phi_1(r, \mu, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n A_{n,1}^m \frac{P_n^m(\mu)}{r^{n+1}} \cos m\varphi, \quad (2)$$

$$\phi_2(r_2, \mu_2, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n B_{n,2}^m \frac{P_n^m(\mu_2)}{r_2^{n+1}} \cos m\varphi. \quad (3)$$

Второй нижний индекс коэффициентов указывает на систему координат, в которой проведено разложение.

Переразложение потенциалов ϕ_1, ϕ_2 во взаимных системах координат реализуется с помощью взаимного представления шаровых функций, отнесенных к соответствующей системе координат. При $r < R$ справедлива формула [26]

$$\begin{aligned}\frac{P_n^m(\mu_2)}{r_2^{n+1}} &= \frac{(-1)^{n-m}}{R^{n+1}} \times \\ &\times \sum_{k=m}^{\infty} \frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!} \left(\frac{r}{R}\right)^k P_k^m(\mu),\end{aligned}\quad (4)$$

следовательно, потенциал второй сферической частицы в системе координат, связанной с первой, можно представить в виде

$$\phi_2(r, \mu, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n B_{n,1}^m r^n P_n^m(\mu) \cos m\varphi, \quad (5)$$

где

$$B_{n,1}^m = \frac{1}{R^n} \sum_{k=m}^{\infty} \frac{(-1)^{k-m} (k+n)!}{(k-m)!(n+m)!} \frac{B_{k,2}^m}{R^{k+1}}. \quad (6)$$

Аналогично, при $r_2 < R$

$$\phi_1(r_2, \mu_2, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n A_{n,2}^m r_2^n P_n^m(\mu_2) \cos m\varphi, \quad (7)$$

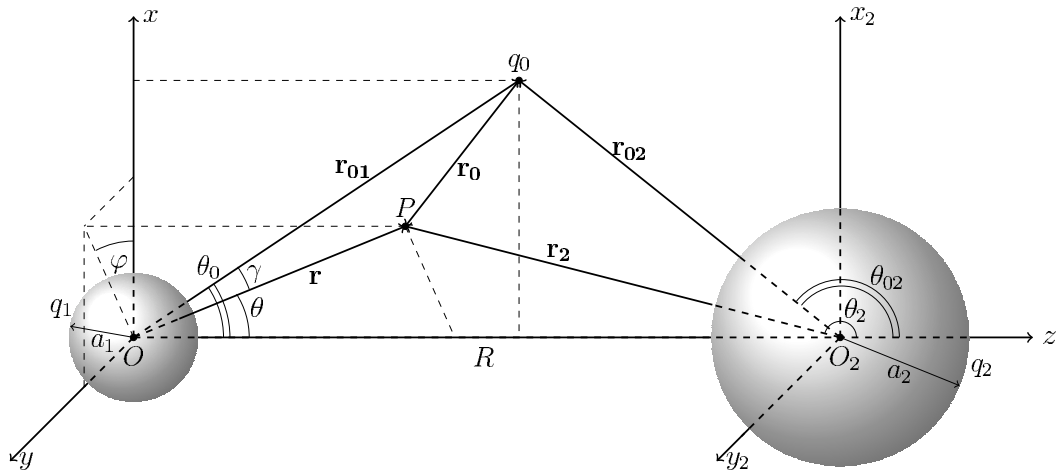


Рис. 1. Геометрия задачи о взаимодействии двух сферических шаров с точечным зарядом q_0 ; O — центр первой макрочастицы с радиусом a_1 и зарядом q_1 , O_2 — центр второй макрочастицы с радиусом a_2 и зарядом q_2 ; r , θ и r_{01} , θ_0 — радиус-вектор, полярный угол точки наблюдения P и координаты точечного заряда в сферической системе координат с полюсом в точке O и с осью, направленной к O_2 ; r_2 , θ_2 и r_{02} , θ_{02} — радиус-вектор, полярный угол точки наблюдения P и координаты точечного заряда в сферической системе координат с полюсом в центре второй макрочастицы; R — расстояние между центрами макрочастиц, r_0 — расстояние между точечным зарядом и точкой наблюдения

где

$$A_{n,2}^m = \frac{(-1)^{n-m}}{R^n} \sum_{k=m}^{\infty} \frac{(k+n)!}{(k-m)!(n+m)!} \frac{A_{k,1}^m}{R^{k+1}}. \quad (8)$$

Наконец, найдем выражение для потенциала третьей частицы в системах координат, связанных с первыми двумя. При $r < r_{01}$ имеем

$$\phi_0 \equiv \frac{q_0}{\varepsilon r_0} = \frac{q_0}{\varepsilon r_{01}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r_{01}} \right)^n P_n(\nu). \quad (9)$$

Здесь мы воспользовались производящей функцией многочленов Лежандра; $\nu = \cos \gamma$, ε — диэлектрическая проницаемость среды. Согласно теореме сложения [27],

$$P_n(\nu) = \sum_{m=0}^n \frac{2}{1 + \delta_{m0}} \times \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\mu_0) P_n^m(\mu) \cos m\varphi, \quad (10)$$

где δ_{m0} — символ Кронекера. Следовательно, в СК1

$$\phi_0(r, \mu, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n C_{n,1}^m r^n P_n^m(\mu) \cos m\varphi, \quad (11)$$

где

$$C_{n,1}^m = \frac{2}{1 + \delta_{m0}} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \frac{q_0}{\varepsilon r_{01}^{n+1}} P_n^m(\mu_0). \quad (12)$$

Выражение для $\phi_0(r_2, \mu_2, \varphi)$ будет отличаться только индексами.

Суммарный потенциал ϕ , полученный как суперпозиция (2), (5) и (11),

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 + \phi_2, \quad (13)$$

и потенциал ϕ_1 из (1) должны удовлетворять граничным условиям, которые на границе однородных диэлектриков имеют вид

$$\begin{aligned} \phi_1|_{r=a_1} &= \phi|_{r=a_1}, \\ \varepsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial r} \Big|_{r=a_1} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial r} \Big|_{r=a_1} &= 4\pi\sigma_{1,f}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь ε_1 — диэлектрическая проницаемость материала первого шара, $\sigma_{1,f}$ — плотность свободного заряда на его поверхности. Считая, что свободный заряд на сферических частицах распределен равномерно, из уравнений (14), дополненных аналогичными для второй частицы, получаем систему уравнений ($n = 0, 1, \dots, m = 0, 1, \dots, n$):

$$\begin{aligned} \frac{A_{n,1}^m}{a_1^{2n+1}} + \beta_{1,n} B_{n,1}^m &= 4\pi\sigma_{1,f} a_1 \delta_{n0} - \beta_{1,n} C_{n,1}^m, \\ \frac{B_{n,2}^m}{a_2^{2n+1}} + \beta_{2,n} A_{n,2}^m &= 4\pi\sigma_{2,f} a_2 \delta_{n0} - \beta_{2,n} C_{n,2}^m, \end{aligned} \quad (15)$$

где $C_{n,2}^m$ — коэффициенты разложения ϕ_0 в СК2, аналогичные (12); $\beta_{1,n}$, $\beta_{2,n}$ — коэффициенты, определенные соотношениями

$$\beta_{i,n} = \frac{n(\varepsilon_i - \varepsilon)}{n\varepsilon_i + (n+1)\varepsilon}, \quad i = 1, 2; \quad (16)$$

ε_i — проницаемость i -го диэлектрического шара.

Из системы (15) с учетом (6), (8) можно найти коэффициенты разложения $A_{n,1}^m$, $B_{n,2}^m$ потенциалов шаров в собственных системах координат. При этом для монопольных членов из (15) следуют явные решения:

$$\begin{aligned} A_{0,1} &= \frac{4\pi\sigma_{1,f}a_1^2}{\varepsilon} \equiv \frac{q_1}{\varepsilon}, \\ B_{0,2} &= \frac{4\pi\sigma_{2,f}a_2^2}{\varepsilon} \equiv \frac{q_2}{\varepsilon}. \end{aligned} \quad (17)$$

2.2. Плотность поверхностного заряда

В ряде работ [11, 16] было показано, что одноименно заряженные тела на близких расстояниях могут испытывать притяжение вследствие перераспределения заряда на их поверхностях. При этом вклад в отталкивание всегда дает свободный заряд, распределение которого $\sigma_{i,f}$ ($i = 1, 2$) мы считаем равномерным. Получим выражение для плотности связанных зарядов $\sigma_{i,b} = \sigma_i - \sigma_{i,f}$, возмущение которой может вызвать притяжение. Плотность полного заряда σ_1 на поверхности диэлектрика определяется скачком напряженности электрического поля:

$$\left. \frac{\partial\phi}{\partial r} \right|_{r=a_1} - \left. \frac{\partial\phi}{\partial r} \right|_{r=a_1} = \frac{4\pi\sigma_1}{\varepsilon}. \quad (18)$$

В итоге из выражений (14) и (18) имеем

$$\sigma_{1,b} = \frac{\varepsilon}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1) \frac{A_{n,1}^m}{a_1^{n+2}} P_n^m(\mu) \cos m\varphi. \quad (19)$$

Отметим, что, подставив в эту формулу $A_{n,1}^m$ из первого уравнения системы (15), можно разделить вклады второй сферической и точечной частиц в плотность заряда на первой (они будут выражаться рядами с общим членом, пропорциональным соответственно $B_{n,1}^m$ и $C_{n,1}^m$). Для второго шара справедливы аналогичные соображения.

2.3. Сила взаимодействия

Найдем теперь составляющие силы, действующей на первый диэлектрический шар. На элемент поверхности частицы действует сила, определяемая максвелловским тензором натяжений [28], проекции которой в декартовой системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} f_{1x} &= \frac{\varepsilon}{4\pi} \left[\frac{1}{2} \sin\theta \cos\varphi (E_r^2 - E_\theta^2 - E_\varphi^2) + \right. \\ &\quad \left. + \cos\theta \cos\varphi E_r E_\theta - \sin\varphi E_r E_\varphi \right] \Big|_{r=a_1}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} f_{1y} &= \frac{\varepsilon}{4\pi} \left[\frac{1}{2} \sin\theta \sin\varphi (E_r^2 - E_\theta^2 - E_\varphi^2) + \right. \\ &\quad \left. + \cos\theta \sin\varphi E_r E_\theta + \cos\varphi E_r E_\varphi \right] \Big|_{r=a_1}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} f_{1z} &= \frac{\varepsilon}{4\pi} \left[\frac{1}{2} \cos\theta (E_r^2 - E_\theta^2 - E_\varphi^2) - \right. \\ &\quad \left. - \sin\theta E_r E_\theta \right] \Big|_{r=a_1}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь E_r , E_θ , E_φ — компоненты электрического поля $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ вдоль ортов СК1.

Полную силу получим интегрированием выражений (20)–(22) по поверхности первой сферы. Используя известные интегралы от выражений, содержащих присоединенные функции Лежандра, приходим к следующим формулам для компонент силы:

$$\begin{aligned} F_{1x} &= -\frac{\varepsilon}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (1 + \delta_{m0}) \frac{(n+m+2)!}{(n-m)!} \times \\ &\quad \times \left[A_{n,1}^m (B_{n+1,1}^{m+1} + C_{n+1,1}^{m+1}) - \right. \\ &\quad \left. - A_{n+1,1}^{m+1} (B_{n+2,1}^m + C_{n+2,1}^m) \right], \end{aligned} \quad (23)$$

$$F_{1y} = 0,$$

$$\begin{aligned} F_{1z} &= -\varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{1 + \delta_{m0}}{2} \frac{(n+m+1)!}{(n-m)!} \times \\ &\quad \times A_{n,1}^m (B_{n+1,1}^m + C_{n+1,1}^m). \end{aligned}$$

Полученные выражения позволяют рассмотреть вклады второго шара и точечной частицы независимо. Последний мы бы могли найти, взяв с обратным знаком величину проекции силы, с которой первая сферическая частица действует на точечную:

$$\mathbf{F}_0^{(1)} = -q_0 \nabla\phi_1|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_{01}}. \quad (24)$$

2.4. Момент силы взаимодействия

В ряде работ (см., например, [29–37]) было экспериментально обнаружено собственное вращение пылевых частиц в пылевой плазме. В работе [14] было показано, что к этому может приводить неоднородное распределение свободного заряда на поверхности пылевой частицы. Поэтому получим выражение для момента силы электростатического взаимо-

действия, действующей на первую частицу, который определяется выражением [28]

$$\mathbf{M}_1 = \frac{\varepsilon a_1^2}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ [\mathbf{r} \times \mathbf{E}] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) - \frac{1}{2} E^2 [\mathbf{r} \times \mathbf{n}] \right\} \Big|_{r=a_1} \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (25)$$

где $\mathbf{n}$ — вектор нормали к поверхности первой сферы. Отсюда с учетом того, что $\mathbf{n} = \mathbf{e}_r$, находим

$$\mathbf{M}_1 = \frac{\varepsilon a_1^3}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi E_r [E_\theta \mathbf{e}_\varphi - E_\varphi \mathbf{e}_\theta] \Big|_{r=a_1} \times \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (26)$$

Интегрируя (26) (интегралы от произведений шаровых функций см. в [38]), для рассматриваемой здесь задачи, симметричной относительно плоскости xz , находим

$$M_{1,x} = 0, \quad M_{1,z} = 0, \quad (27)$$

$$M_{1,y} = \frac{\varepsilon}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(n+m+1)!}{(n-m-1)!} \left[A_{n,1}^{m+1} (B_{n,1}^m + C_{n,1}^m) - A_{n,1}^m (B_{n,1}^{m+1} + C_{n,1}^{m+1}) \right]. \quad (28)$$

Обращение в нуль x - и z -составляющих момента силы в нашей задаче вызвано тем, что плоскость xz является плоскостью симметрии и ось вращения может быть только перпендикулярной этой плоскости.

В случае равномерной зарядки первой частицы из первого уравнения системы (15) следует равенство

$$B_{n,1}^m + C_{n,1}^m = -\frac{1}{a_1^{2n+1} \beta_{1,n}} A_{n,1}^m, \quad n \geq 1, \quad 0 \leq m \leq n,$$

подстановка которого в выражение (28) приводит к обнулению и y -составляющей момента: $M_{1,y} = 0$. Следовательно, при равномерной зарядке рассматриваемой частицы присутствие третьей точечной частицы, нарушающей аксиальную симметрию задачи, не может приводить к возникновению ее собственного вращения.

В заключение данного раздела отметим, что непосредственное использование формул (19), (23), как показали расчеты, в области малых межчастичных расстояний приводит к сильному снижению точности. Особенно это заметно при визуализации распределения заряда по поверхности сферической частицы, где из-за близости точечного заряда и вызванного им дельтаобразного пика плотности

на сферической поверхности возникают чередующиеся области противоположных знаков, тем более явные, чем меньше число учитываемых членов в рядах и чем мельче сетка, в точках которой вычисляется плотность заряда. Для решения этой проблемы ряды, содержащие коэффициенты разложения потенциала точечной частицы $C_{n,1}^m$, преобразуем таким образом, чтобы под знаком суммы не оставалось медленно сходящихся членов.

3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ШАРА И ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА: ПРОЦЕДУРА УСКОРЕНИЯ СХОДИМОСТИ

Как подчеркивалось выше, выражения (19) и (23) позволяют выделить вклад точечной частицы, вызывающий ухудшение сходимости входящих в них рядов. Покажем, как можно преобразовать исходные формулы, для чего рассмотрим систему из двух частиц: сферической и точечной.

Будем придерживаться обозначений, принятых в разд. 2. Исключим из рассмотрения вторую сферу и положим $\mu_0 = 1$. Известно [18,19], что электростатический потенциал первой диэлектрической частицы равен

$$\phi_1 = \frac{q_1}{\varepsilon r} - \frac{q_0}{\varepsilon r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_{1,n} \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^{n+1} r^n} P_n(\mu). \quad (29)$$

Входящий в это выражение ряд преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_{1,n} \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^{n+1} r^n} P_n(\mu) &= -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \frac{a_1}{r_{01}} \times \\ &\times \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{r'_{01}}{r^n} \right)^n P_n(\mu) + \right. \\ &\left. + 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'_{01}}{r^n} \right)^n P_n(\mu) \right], \quad (30) \end{aligned}$$

где r'_{01} — расстояние, определяющее инверсный образ точки, в которой находится заряд q_0 , относительно поверхности сферы: $r'_{01} = a_1^2/r_{01}$. Тогда, по определению производящей функции, ряд в последнем слагаемом при $r > r'_{01}$ равен $1/r'_0$, где r'_0 — расстояние от образа до точки наблюдения (см. рис. 2):

$$r'_0 = \sqrt{r^2 + r_{01}^2 - 2rr'_{01}\mu}.$$

Обозначив

$$q'_0 = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \frac{a_1}{r_{01}} q_0, \quad (31)$$

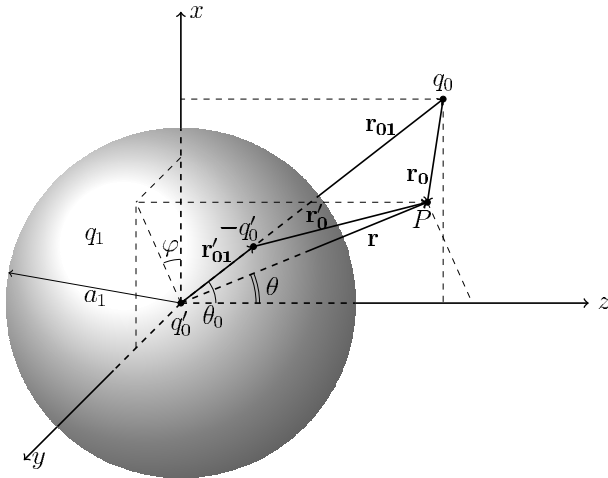


Рис. 2. Положение зарядов-изображений, возникающих при взаимодействии сферической и точечной частиц

из (29), (30) получим

$$\phi_1 = \frac{q_1}{\varepsilon r} + \frac{q'_0}{\varepsilon r} - \frac{q'_0}{\varepsilon r'_0} + \frac{q'_0}{\varepsilon r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{r'_{01}}{r} \right)^n P_n(\mu). \quad (32)$$

Таким образом, из ряда в (29) мы в явном виде выделили вклады двух зарядов-изображений: $+q'_0$ в центре сферы и $-q'_0$ на расстоянии r'_{01} от него. Отметим, что общий член ряда в преобразованном выражении (32) при $r_{01} \simeq a_1$ убывает на порядок быстрее по сравнению с исходным (29).

Преимущество в скорости сходимости потенциала, рассчитанного по новой формуле, продемонстрировано на рис. 3. Здесь L — расстояние между поверхностью диэлектрического шара и точечным зарядом: $L = r_{01} - a_1$. На рис. 3 дана угловая зависимость потенциала при $r = a_1 + L/2$. Видно, что модифицированная формула для потенциала обеспечивает большую устойчивость, особенно в области, близкой к полярной оси.

Из выражения (29) можно получить известную формулу для силы взаимодействия [18]:

$$F = \frac{q_0 q_1}{\varepsilon r_{01}^2} - \frac{q_0^2}{\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{a_1}{r_{01}} \right)^{2n+1} \quad (33)$$

(положительное значение силы соответствует отталкиванию, отрицательное — притяжению). Используя выражение (32), находим альтернативную фор-

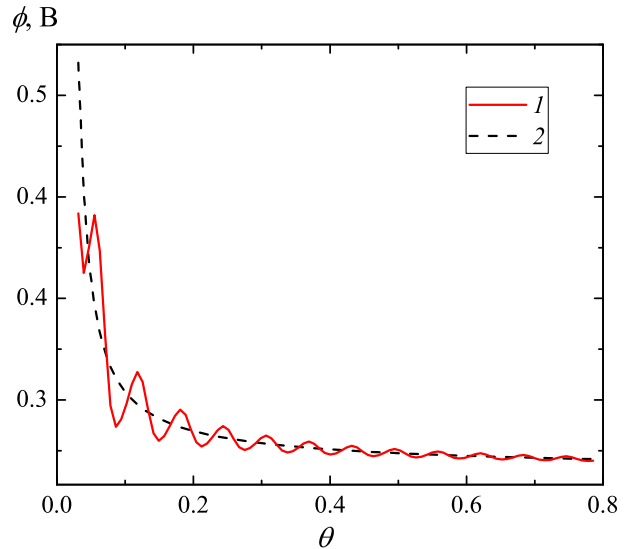


Рис. 3. Потенциал шара при $r = a_1 + 0.5L$ в зависимости от полярного угла θ , найденный по формулам (29) и (32) (кривые 1 и 2 соответственно) при $a_1 = 1$ мкм, $q_1 = 10^2 e$, $\varepsilon_1 = 25$, $q_0 = 50e$

мулу для силы, которая, как ожидается, будет давать лучшую сходимость:

$$F = \frac{q_0 q_1}{\varepsilon r_{01}^2} + \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon r_{01}^2} - \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon (r_{01} - r'_{01})^2} + \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1)\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{a_1}{r_{01}} \right)^{2n}. \quad (34)$$

Второе и третье слагаемые в (34) соответствуют кулоновскому взаимодействию точечного заряда q_0 с двумя его изображениями, причем третье слагаемое быстро растет по абсолютной величине по мере сближения сферической и точечной частиц, что на достаточно малых межчастичных расстояниях приводит к переходу от отталкивания одноименных зарядов к их притяжению.

Из табл. 1 видно, что расчеты по формуле (34) с учетом всего нескольких первых членов ряда уже приводят к результату, отличающемуся от окончательного только в третьей-четвертой значащей цифре. Для достижения такой точности при расчетах с использованием исходной формулы (33), если L достаточно мало, может потребоваться вплоть до нескольких тысяч членов.

Отметим, что задача, поставленная в данной работе, предполагает решение системы линейных уравнений (15) с матрицей порядка $(N-m) \times (N-m)$ для каждого $m = 0, 1, \dots, M$ (в силу отсутствия аксиальной симметрии), причем максимальное значение $M \leq N$ определяется скоростью убывания

Таблица 1. Сравнение расчетов по формулам (33) и (34) для силы взаимодействия сферической и точечной частиц при $q_1 = 10^2 e$, $a_1 = 1$ мкм, $\varepsilon_1 = 25$, $q_0 = 50e$ для межчастичных расстояний $L_1 = 1$ нм, $L_2 = 10^2$ нм и $L_3 = 10^4$ нм

	N	10	100	1000	7000
$L = 1$ нм	Из (33) в 10^{-7} Н	$-3.26 \cdot 10^{-4}$	$-2.39 \cdot 10^{-2}$	-0.79122	-1.33087
	Из (34) в 10^{-8} Н	-1.33099	-1.33097	-1.33090	-1.33089
	N	2	5	20	100
$L = 100$ нм	Из (33) в 10^{-11} Н	$-4.88 \cdot 10^{-2}$	-0.32216	-1.07034	-1.18280
	Из (34) в 10^{-11} Н	-1.18865	-1.18592	-1.18297	-1.18280
	N	1	2	3	5
$L = 10^4$ нм	Из (33) в 10^{-15} Н	9.52701	9.52693	9.52693	9.52693
	Из (34) в 10^{-15} Н	9.52693	9.52693	9.52693	9.52693

коэффициентов (12). Это накладывает определенные ограничения на количество учитываемых членов разложения N ; в финальных расчетах мы положили $N = 40$. Как видно из полученных в этом разделе данных, этого вполне достаточно для достижения приемлемой точности при вычислении вклада точечного заряда в силу взаимодействия.

Получим теперь выражение для плотности связанных зарядов на поверхности сферической частицы, находящейся в поле точечного заряда. Выражение (19) с учетом вида потенциала (29) в данном случае переходит в следующее:

$$\sigma_{1,b} = -\frac{q_0}{4\pi a_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \beta_{1,n} \left(\frac{a_1}{r_{01}}\right)^{n+1} P_n(\mu).$$

Прделав преобразования с общим членом ряда, аналогичные выполненным при получении (30), после некоторых алгебраических преобразований формулы для производящей функции приходим к следующему выражению:

$$\sigma_{1,b} = \frac{q'_0}{4\pi a_1^2} \left[1 - \frac{r_{01} (r_{01}^2 - a_1^2)}{(a_1^2 + r_{01}^2 - 2a_1 r_{01} \mu)^{3/2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{a_1}{r_{01}}\right)^n P_n(\mu) \right]. \quad (35)$$

Здесь q'_0 по-прежнему обозначает величину зарядов-изображений (31). Выражение в знаменателе второго слагаемого в квадратных скобках — это расстояние от q_0 до точки на сфере, задаваемой переменной μ . Ясно, что при $\mu = 1$ это расстояние тем меньше отличается от нуля, чем ближе точечная частица к поверхности сферической. Как показывают расчеты, после выделения этой сингулярности ряд в последнем слагаемом (35) сходится достаточно быстро.

4. СИЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ $a_2/R \ll 1$

Рассмотрим случай, когда в поляризацию поверхностного заряда первой частицы основной вклад от второй частицы вносит монополярный член разложения потенциала этой частицы, а вкладом более высоких мультипольных моментов можно пренебречь. Такой случай реализуется при $a_2/R \ll 1$. В этом случае в разложении (6) коэффициента $B_{n,1}^m$ остается только $B_{0,2}$, поэтому все коэффициенты с $m \geq 1$ исчезают: $B_{n,1}^m = 0$, а коэффициенты для $m = 0$ с учетом (17) принимают вид

$$B_{n,1} = \frac{q_2}{\varepsilon R^{n+1}}. \quad (36)$$

Теперь из первого уравнения системы (15) находим

$$A_{n,1}^m = -a_1^{2n+1} \beta_{1,n} (B_{n,1} \delta_{m0} + C_{n,1}^m), \quad n = 1, 2, \dots, \infty, m = 0, 2, \dots, n. \quad (37)$$

На основе найденного приближенного решения, для составляющих силы взаимодействия из (23) получим выражения

$$\begin{aligned} F_{1x} \approx & -\frac{q_0 q_1}{\varepsilon r_{01}^2} P_1^1(\mu_0) - \\ & -\frac{q_0}{\varepsilon r_{01}^2} P_1^1(\mu_0) \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon} \left(q_2 \frac{a_1^3}{R^3} + q_0 \frac{a_1^3}{r_{01}^3} P_2(\mu_0) \right) + \\ & + \frac{q_0 q_2}{2\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} P_{n+1}^1(\mu_0) \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^n R^{n+1}} \left(\beta_{1,n} - \frac{a_1^2}{R^2} \beta_{1,n+1} \right) + \\ & + \frac{\varepsilon}{4} \frac{q_0^2}{\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^{2n+1}} P_{n+1}^{m+1}(\mu_0) \times \\ & \times \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \beta_{1,n} P_n^m(\mu_0) - \right. \\ & \left. - \frac{a_1^2}{r_{01}^2} \beta_{1,n+1} \frac{(n-m+2)!}{(n+m+2)!} P_{n+2}^m(\mu_0) \right], \quad (38) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{1z} \approx & -\frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_1 q_0}{\varepsilon r_{01}^2} P_1(\mu_0) + \\
& + \frac{q_2^2}{\varepsilon R^2} \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) \beta_{1,n} \frac{a_1^{2n+1}}{R^{2n+1}} + \\
& + \frac{q_0 q_2}{\varepsilon r_{01} R} \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) \beta_{1,n} \frac{a_1^n}{r_{01}^n} \frac{a_1^n}{R^n} \times \\
& \times \left[\frac{a_1}{R} P_n(\mu_0) + \frac{a_1}{r_{01}} P_{n+1}(\mu_0) \right] + \\
& + \frac{q_0^2}{2\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n (1 + \delta_{m0}) \beta_{1,n} \frac{(n+1-m)!}{(n+m)!} \times \\
& \times \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^{2n+1}} P_n^m(\mu_0) P_{n+1}^m(\mu_0). \quad (39)
\end{aligned}$$

В выражении (38) первый член соответствует x -составляющей силы взаимодействия “точечных” зарядов q_0 и q_1 , z -составляющая этой силы — второй член в правой части (39). Из (38) видно, что F_{1x} прямо пропорциональна q_0 и исчезнет, если удалить точечную частицу. Отметим, что ценность выражений (38) и (39) заключается в том, что они справедливы при любом положении третьей точечной частицы, требуется только выполнение условия $a_2/R \ll 1$. В этих формулах можно также выделить расходящуюся при малых значениях $L_{01} = r_{01} - a_1$ часть силы взаимодействия, как это было сделано в разд. 3.

Рассмотрим более простой случай расположения зарядов, когда точечный заряд лежит на оси z и задача становится аксиально-симметричной. При этом $\theta = 0$ или π и $\mu_0 = \pm 1$. В этом случае x -составляющая сила станет равной нулю: $F_{1x} = 0$. Для z -составляющей с учетом того, что $P_n(1) = 1$, $P_n(-1) = (-1)^n$, из (39) находим

$$\begin{aligned}
F_{1z} = & \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_1 q_0}{\varepsilon r_{01}^2} \mu_0 + \\
& + \frac{1}{\varepsilon a_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) \beta_{1,n} \Psi_n \Psi_{n+1}, \quad (40)
\end{aligned}$$

где величина Ψ_n определена соотношением

$$\Psi_n = q_2 \frac{a_1^{n+1}}{R^{n+1}} + q_0 \frac{a_1^{n+1}}{r_{01}^{n+1}} \mu_0^n.$$

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

5.1. Сила взаимодействия

Применим теперь описанную в разд. 3 процедуру к задаче, поставленной в статье. Проекцию силы на ось z , с которой на первую сферическую частицу

действует вторая, будем находить согласно (23) по формуле

$$\begin{aligned}
F_{1z}^{(2)} = & -\varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{1 + \delta_{m0}}{2} \frac{(n+m+1)!}{(n-m)!} \times \\
& \times A_{n,1}^m B_{n+1,1}^m. \quad (41)
\end{aligned}$$

Вклад точечной частицы вычислим по формуле (24). Для этого в потенциал (2) подставим $A_{n,1}^m$ из первого уравнения системы (15), раскроем скобки и преобразуем ряд, содержащий коэффициенты $C_{n,1}^m$, для которых мы имеем явные формулы (12). Это приведет нас к выражению, аналогичному (32) и переходящему в него при $m = 0$, $\mu_0 = 1$ и $B_{n,1}^m = 0$. Соответствующая сила (взятая с обратным знаком, чтобы отражать действие точечной частицы на первую сферическую) оказывается равной

$$\begin{aligned}
F_{1z}^{(0)} = & -\frac{q_0 q_1}{\varepsilon r_{01}^2} \mu_0 - \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon r_{01}^2} \mu_0 + \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon (r_{01} - r'_{01})^2} \mu_0 - \\
& - \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{2}{1 + \delta_{m0}} \frac{(n-m+1)!}{(n+m)!} \times \\
& \times \frac{\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \left(\frac{a_1}{r_{01}} \right)^{2n} P_n^m(\mu_0) P_{n+1}^m(\mu_0) + \\
& + \frac{q_0}{r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n (n-m+1) \beta_1^n B_{n,1}^m \times \\
& \times \frac{a_1^{2n+1}}{r_{01}^{2n+1}} P_{n+1}^m(\mu_0). \quad (42)
\end{aligned}$$

Полная сила, действующая на первый диэлектрический шар вдоль оси z , есть сумма (41) и (42).

Вклад второго шара в силу, действующую на первый вдоль оси x , выделим из выражения (23):

$$\begin{aligned}
F_{1x}^{(2)} = & -\frac{\varepsilon}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (1 + \delta_{m0}) \frac{(n+m+2)!}{(n-m)!} \times \\
& \times (A_{n,1}^m B_{n+1,1}^{m+1} - A_{n+1,1}^{m+1} B_{n,1}^m). \quad (43)
\end{aligned}$$

Для силы, действующей на первый шар со стороны точечной частицы вдоль оси x , имеем модифицированную формулу:

$$\begin{aligned}
F_{1x}^{(0)} = & \left[-\frac{q_0 q_1}{\varepsilon r_{01}^2} - \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon r_{01}^2} + \frac{q_0 q'_0}{\varepsilon (r_{01} - r'_{01})^2} \right] P_1^1(\mu_0) - \\
& - \frac{q_0}{r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{a_1^n}{r_{01}^n} \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \frac{q'_0}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \frac{a_1^n}{r_{01}^n} \times \right. \\
& \times P_n^m(\mu_0) - \frac{1 + \delta_{m0}}{2} \beta_1^n a_1^{n+1} B_{n,1}^m \left. \right] \left[P_{n+1}^{m+1}(\mu_0) - \right. \\
& \left. - (n-m+1)(n-m+2) P_{n+1}^{m-1}(\mu_0) \right]. \quad (44)
\end{aligned}$$

В работах [11, 16] исследовался вопрос о том, при каких соотношениях размеров, зарядов и значениях диэлектрических проницаемостей две одноименно-заряженные сферические частицы по мере сближения могут начать притягиваться друг к другу. Проанализируем влияние третьей частицы на этот переход. Рассмотрим сначала пару одинаковых диэлектрических шаров, которые при равных зарядах согласно [16] ни на каких расстояниях притяжения не испытывают. Расчеты показывают, что присутствие третьей частицы приводит к изменению характера их взаимодействия только при малых расстояниях между их поверхностями, причем сам точечный заряд должен находиться в очень ограниченной области между ними. При этом понятно, что смена знака проекции силы, действующей на каждую из сфер, происходит вследствие притяжения к точечной частице, обусловленного третьим слагаемым в формуле (42), на малых расстояниях преобладающим над остальными.

Рассмотрим теперь сферические частицы с таким соотношением размеров и зарядов, при которых притяжение между ними возможно (мы выбрали параметры, соответствующие кривой 2 рисунка 5 в статье [16]), и расположим их на расстоянии чуть большем и чуть меньшем переходного. Как и следовало ожидать, в этом случае влияние третьей частицы качественно заметнее и проявляется в более широком диапазоне изменения ее координат. На рис. 4а сферические частицы в отсутствие точечной отталкиваются друг от друга — и продолжают отталкиваться (область 1), если последняя находится в правой полуплоскости (т. е. при $z_0 > 0$), не считая области вблизи поверхностей шаров при $0 < z_0 < R$. Притяжение (область 2) возникает, когда точечный заряд расположен в кольцевидной области вокруг большей из сфер, за исключением тонких участков (область 3) внутри при $z_0 < 0$ и снаружи при $z_0 > 0$. В этих участках, а также у поверхности второй частицы со стороны, обращенной к первой (т. е. при $z_0 < L$), знаки обеих сил отрицательные, а в довольно широкой области за большей из частиц, наоборот, положительные (область 4). В этих случаях нельзя говорить о взаимном притяжении или отталкивании сферических частиц.

На рис. 4б показано, как положение неполяризуемой частицы влияет на режим взаимодействия диэлектрических шаров с теми же параметрами, но находящихся на чуть меньшем расстоянии, когда для изолированной пары отталкивание уже перешло в притяжение. В основной части пространства, окружающего сферы, точечная частица, как и раньше,

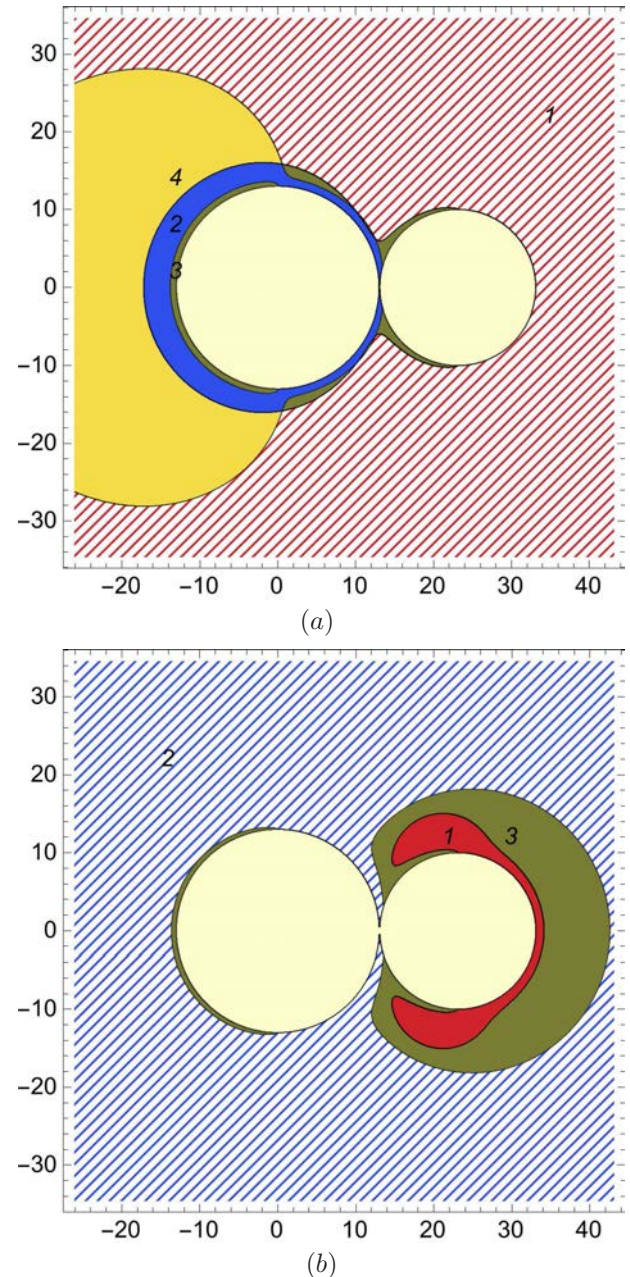


Рис. 4. Области притяжения и отталкивания сферических частиц в зависимости от положения точечной при $a_1 = 1.3a_2$, $a_2 = 10$ мкм, $q_0 = 50e$, $q_1 = 3q_2$, $q_2 = 10^3e$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 25$ при межчастичном расстоянии $L = 100$ нм (а) и $L = 70$ нм (б). Область 1 — имеет место отталкивание сферических частиц, 2 — притяжение, 3 — знаки обеих сил отрицательные, 4 — знаки обеих сил положительные; на рис. 4а заштрихована область отталкивания, а на рис. 4б — область притяжения

не меняет характер их взаимодействия, но теперь та область, где ее влияние приводит к смене знаков обеих сил (область 1), находится за меньшей из них и становится тем шире по x , чем ближе q_0 к q_1 , в отличие от предыдущего случая. Кроме того, пере-

хода от притяжения к отталкиванию не возникает, когда точечный заряд располагается в промежутке между сферическими поверхностями; как мы видели, в этой зоне при изначальном отталкивании притяжение возникает в первую очередь. Отметим сходство с ранее рассмотренным случаем чуть большего межчастичного расстояния: здесь мы также видим отрицательные знаки сил в областях у сферических поверхностей при $\pi/2 < \theta_{1,2} < 3\pi/2$ (область 3). Однако основной участок, где обе силы обращены против оси z , окружает меньшую из сфер и по форме напоминает область положительных F_{1z} и F_{2z} (область 4) вокруг большей из них, которую мы видели в предыдущей конфигурации. При этом в рассматриваемом случае такого режима не наблюдается во все.

Дадим несколько более общую картину зависимости сил, действующих на сферические частицы, от положения точечной. На рис. 5 приведены данные для векторов $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2$ как функций (x_0, z_0) , полученные с использованием формул (43), (44) для x -компоненты и аналогичных выражений для второй макрочастицы. На данном рисунке длины векторов не согласованы с абсолютным значением сил взаимодействия, за счет чего анализ становится проще, но имеет качественный характер. Однако, в отличие от еще более упрощенного и наглядного рис. 4, данные на рис. 5 позволяют определить, в каких участках критических областей (т.е. тех, где характер взаимодействия сфер противоположен невозмущенному) действительно имеет место «чистое» притяжение или отталкивание. Это можно сделать исходя из отклонения изображенных векторов от оси z : мы говорим об относительно «чистом» притяжении, если $\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{e}_z \approx |\mathbf{F}_1|$ и $\mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{e}_z \approx -|\mathbf{F}_2|$; аналогичное определение можно сформулировать для отталкивания. Так, в случае макрочастиц, находящихся на границе перехода от отталкивания к притяжению (рис. 4a), описанная ситуация возникает, только когда точечный заряд находится за большей из сфер (см. рис. 5a). Если же переход уже совершен (рис. 4b), отталкивание скорее будет вызвано третьей частицей, находящейся вблизи меньшей из них возле оси x_2 , что видно из рис. 5b.

Представленные рисунки указывают только на знаки сил F_{1z} и F_{2z} и описывают взаимодействие частиц лишь качественно. Для получения количественной картины рассмотрим зависимость величины z -компоненты силы, действующей на первый шар при $L = 100$ нм (что соответствует рис. 4a), от положения третьей частицы (см. рис. 6). В участках, занятых сферами, значение силы для наглядности

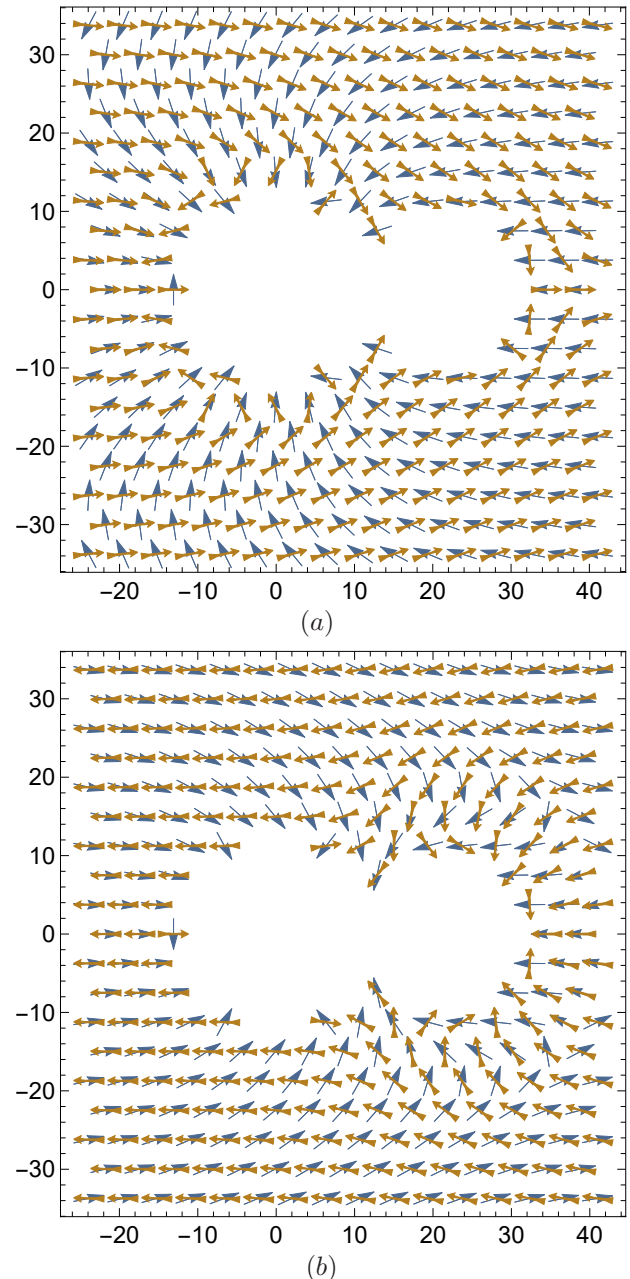


Рис. 5. Поле сил $\mathbf{F}_1$ (тонкие стрелки) и $\mathbf{F}_2$ (жирные стрелки) в зависимости от координат точечной частицы. Параметры частиц и межчастичные расстояния, как на рис. 4

выбрано таким, каким бы оно было в отсутствие точечного заряда.

В первую очередь внимание на себя обращает область вблизи первой сферической частицы, где касательная плоскость к графику почти вертикальна. В этой области (см., например, рис. 4) вне зависимости от параметров сферических частиц, возможности возникновения притяжения между ними и реализованности этого перехода та или иная частица испытывает силу, z -проекция которой имеет тот

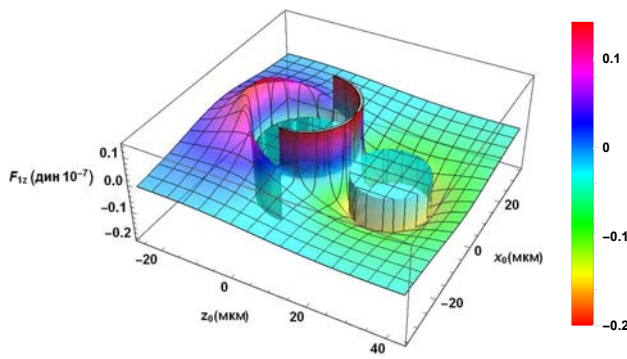


Рис. 6. Зависимость z -компоненты полной силы, действующей на первый диэлектрический шар, от положения точечного заряда. Параметры частиц соответствуют рис. 4, расстояние между сферическими поверхностями $L = 100$ нм. В отсутствие третьей частицы сферы отталкиваются с силой $2.84 \cdot 10^{-14}$ Н

же знак, что z -координата точечного заряда в соответствующей системе координат. Учитывая рис. 6 и аналогичные ему картины для второго шара, можно говорить, что при различных параметрах системы не меняется не только знак проекции силы, но и то, как резко ее абсолютная величина отличается от таковой на некотором удалении от сфер. Как уже говорилось выше, причину следует искать в третьем слагаемом в формуле (42): даваемый им вклад при малых r_{01} многократно превышает вклады других слагаемых, равно как и само значение проекции силы при больших расстояниях между точечной и сферической частицами.

Рассмотрим более детально влияние точечной частицы на направление силы, действующей на шар, когда расстояние между ними мало. На рис. 7 приведены зависимости z -проекции полной силы, действующей на первую частицу, от положения точечного заряда на оси z , полученные из решения системы (15) и по приближенной формуле (40). Для приведения к безразмерной силе использована сила взаимодействия точечного заряда с наведенным им поверхностным зарядом, определяемая выражением

$$F_{z1} = \frac{q_0^2}{\varepsilon r_{01}^2} \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) \beta_{1,n} \left(\mu_{01} \frac{a_1}{r_{01}} \right)^{2n+1}. \quad (45)$$

Как видно из выражения (45), эта сила при $\mu_{01} = 1$ (как на рис. 7) положительна, поэтому знак приведенной силы при изменении L_{01} не меняется.

Из рис. 7 видно, что при малых расстояниях между поверхностью первой частицы и точечной частицей сила взаимодействия точечного заряда с наведенным им поверхностным зарядом оказывается преобладающей, но по мере удаления точечного

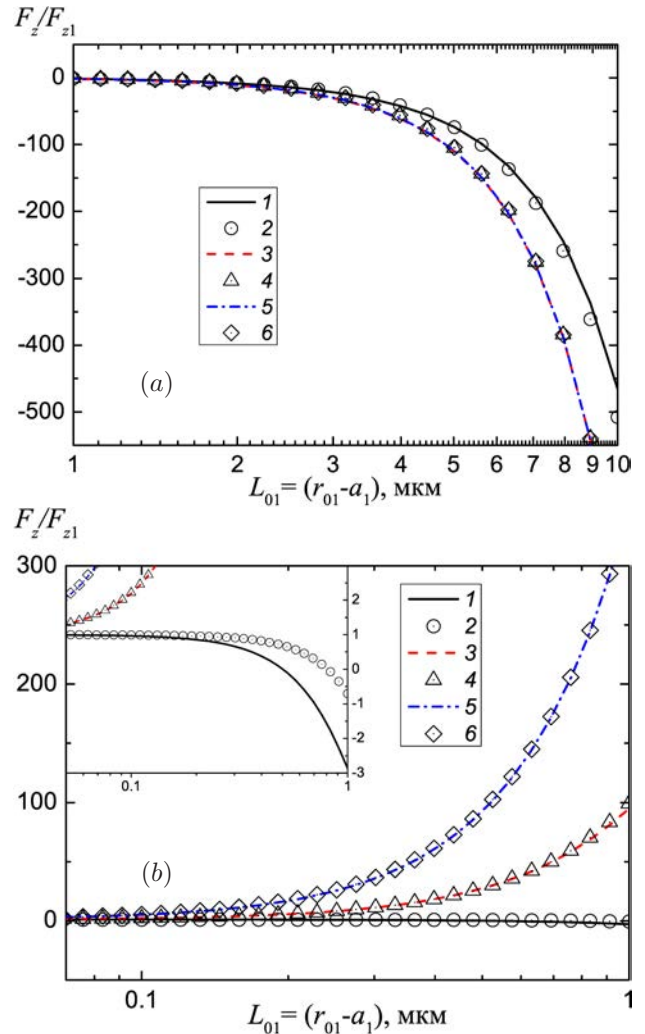


Рис. 7. Зависимости z -проекции полной силы, действующей на первую частицу, от положения точечного заряда на оси z . Данные для кривых 1, 3 и 5 получены из решения системы (15), 2, 4 и 6 — по приближенной формуле (40). Расчеты проведены при $q_1 = q_2 = 10^3 e$, $a_1 = 10$ мкм, $a_2 = 10$ (1, 2), 1 (3, 4), 0.1 (5, 6) мкм, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 25$, $q_0 = 50e$, $L = 10$ (a), 1 (b) мкм. Здесь F_{z1} — сила взаимодействия точечного заряда с наведенным им поверхностным зарядом, определенная выражением (45)

заряда от поверхности первой частицы она становится все меньше и меньше. Из рис. 7 также видно, что приближенная формула (40) является достаточно точной и ее точность растет по мере уменьшения радиуса второй частицы как при $L = 10$ мкм, так и при $L = 1$ мкм. Из вкладки на рис. 7b видно, что при $L = 1$ мкм для частиц одинакового размера формула (40) при $L_{01} > 0.1$ мкм приводит к значительным ошибкам. Нужно отметить, что при выполнении условия $a_2 \ll R$ выражение (40) не теряет своей точности и при меньших рассмотренных на рис. 7 значениях L .

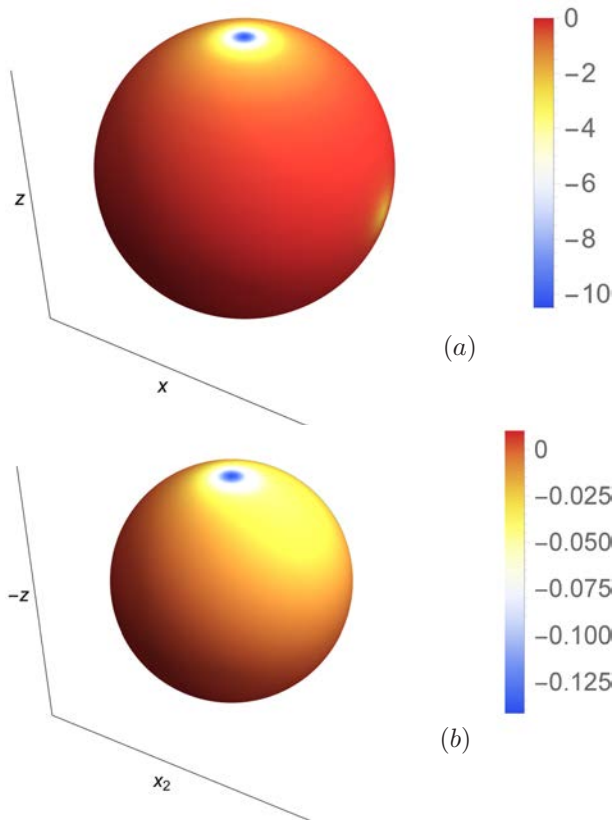


Рис. 8. Плотность связанных зарядов на поверхности первой (а) и второй (б) диэлектрических частиц с характеристиками, соответствующими рис. 4а; положение точечного заряда: $x = 15$ мкм, $z = 0$, значения плотности приведены в $[e/\text{мкм}^2]$, e — элементарный заряд

5.2. Плотность поверхностного заряда

Перейдем к вычислению поверхностной плотности заряда на сферах и анализу влияния точечной частицы на ее распределение. Как и в случае с проекцией силы взаимодействия, приведем модифицированную версию формулы (19):

$$\begin{aligned} \sigma_{1,b} = & \frac{q'_0}{4\pi a_1^2} \left[1 - \frac{r_{01}(r_{01}^2 - a_1^2)}{(a_1^2 + r_{01}^2 - 2a_1 r_{01} \nu)^{3/2}} + \right. \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{2}{1 + \delta_{m0}} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \frac{(2n+1)\varepsilon}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \times \\ & \times \frac{a_1^n}{r_{01}^n} P_n^m(\mu_0) P_n^m(\mu) \cos m\varphi \Big] - \\ & - \frac{\varepsilon}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{n(2n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{n\varepsilon_1 + (n+1)\varepsilon} \times \\ & \times B_{n,1}^m a_1^{n-1} P_n^m(\mu) \cos m\varphi. \quad (46) \end{aligned}$$

Выражение в правой части, занимающее строки 1–3 в приведенной формуле, отвечает вкладу точеч-

ной частицы и представляет собой обобщение (35) на случай отсутствия аксиальной симметрии в расположении частиц. Последний член дает вклад второго диэлектрического шара в соответствии с формулой (19) и первым уравнением (15). Полученная формула обнаруживает хорошую скорость сходимости, в том числе при существенно более близких к нулю расстояниях между сферической поверхностью и точечным зарядом, чем рассматриваемые далее.

Расчеты показывают, что при параметрах сферических частиц, как на рис. 4, степень поляризации поверхностного заряда на большей из них существенно выше, чем на меньшей: если в первом случае значения плотности заряда на полюсах (ближайшем ко второму шару и противоположном ему, соответственно) составляют -12.3 и $+0.189$, то во втором — лишь -0.150 и $+0.00144$ (здесь и далее плотность выражена в элементарных зарядах на квадратный микрон). Для исследования влияния точечной частицы на картину распределения связанных зарядов на сферах поместим ее в области, которым на рис. 4 соответствует смена знака проекций сил, действующих на сферы, т. е. в области 2 на рис. 4а и 1 на рис. 4б. Одну точку мы взяли на оси x на расстоянии 2 мкм от поверхности первого шара, вторую — на оси x_2 на расстоянии 3 мкм от второго.

Рассмотрим первый случай (см. рис. 8). Как видно из рис. 8а, на фоне «шапки» отрицательного заряда на полюсе первого шара возмущение плотности, вызванное близостью третьей частицы, не так велико. При этом оба участка отрицательной плотности локализованы на довольно небольшой площади и разделены областью положительного заряда. Иначе дело обстоит с плотностью заряда на меньшем из диэлектрических шаров (см. рис. 8б). Ее распределение гораздо более равномерно, так что влияние третьей частицы оказывается заметным даже при больших r_{02} . В рассматриваемом случае, когда другие две частицы расположены недалеко друг от друга, участки вызванного ими возмущения плотности перекрываются, и область отрицательного заряда занимает сравнительно большой телесный угол.

Если же точечная частица расположена ближе к меньшему из шаров, то отрицательный пик плотности, индуцированный ей на его поверхности, оказывается в разы заметнее расположенного на полюсе и вызванного первым диэлектрическим шаром; качественно картина распределения в этом случае напоминает рис. 8а, если поменять местами оси x и z . Что касается первой частицы, при данных параметрах системы и на таком большом расстоянии точечный

заряд не оказывает видимого влияния на распределение связанных зарядов на ее поверхности.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изучено взаимодействие трех заряженных частиц, размером одной из которых можно пренебречь. Установлено, что присутствие третьей частицы может существенно изменить характер взаимодействия двух одноименно заряженных диэлектрических частиц, меняя отталкивание на притяжение и наоборот. Показано, что, несмотря на нарушение аксиальной симметрии при добавлении третьей частицы, при равномерной зарядке диэлектрической частицы сферической формы все компоненты вектора момента силы, действующей на нее, принимают нулевое значение. Продемонстрирована применимость метода выделения вкладов зарядов-изображений для значительного повышения точности расчета поверхностной плотности заряда и силы взаимодействия частиц. Развита в настоящей работе методика расчета может быть использована для учета влияния соседних зарядов на скорость коагуляции частиц в облаке заряженного аэрозоля, при этом влияние дальних заряженных частиц может быть учтено в рамках линейаризованной теории Дебая – Хюккеля.

Финансирование. Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-32-90054 Аспиранты).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Sickafoose, J. E. Colwell, M. Horanyi, and S. Robertson, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6034 (2000).
2. J. D. Sartor, *J. Geophys. Res.* **65**, 1953 (1960).
3. H. T. Ochs and R. R. Czyns, *Nature* **327**, 606 (1987).
4. E. B. Lindgren, B. Stamm, H.-K. Chan et al., *Icarus* **291**, 245 (2017).
5. A. B. Филиппов, И. Н. Дербенев, *ЖЭТФ* **150**, 1262 (2016).
6. J. Q. Feng, *Phys. Rev. E* **62**, 2891 (2000).
7. M. H. Davis, *Q. J. Mech. Appl. Math.* **17**, 499 (1964).
8. J. Lekner, *Proc. Roy. Soc. A* **468**, 2829 (2012).
9. A. B. Филиппов, *ЖЭТФ* **136**, 601 (2009).
10. A. V. Filippov, *Contrib. Plasma Phys.* **49**, 433 (2009).
11. E. Bichoutskaia, A. L. Boatwright, A. Khachatourian, and A. J. Stace, *J. Chem. Phys.* **133**, 024105 (2010).
12. V. Jadhao, Z. Yao, C. K. Thomas, and M. O. De La Cruz, *Phys. Rev. E* **91**, 032305 (2015).
13. I. N. Dербенев, A. V. Filippov, A. J. Stace, and E. Besley, *J. Chem. Phys.* **152**, 024121 (2020).
14. B. P. Муниров, А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **142**, 594 (2012).
15. A. Khachatourian, H.-K. Chan, A. J. Stace, and E. Bichoutskaia, *J. Chem. Phys.* **140**, 074107 (2014).
16. B. P. Муниров, А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **144**, 931 (2013).
17. B. A. Tinsley, *Rep. Prog. Phys.* **71**, 066801 (2008).
18. В. В. Батыгин, И. Н. Топтыгин, *Сборник задач по электродинамике*, Наука, Москва (1970).
19. В. Смайт, *Электростатика и электродинамика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1954) [W. R. Smythe, *Static and Dynamic Electricity*, McGraw-Hill, New York – Toronto – London, 2-nd edition (1950)].
20. J. D. Love, *Q. J. Mech. Appl. Math.* **28**, 449 (1975).
21. Y. Nakajima and T. Sato, *J. Electrostat.* **45**, 213 (1999).
22. E. B. Lindgren, H.-K. Chan, A. J. Stace, and E. Besley, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 5883 (2016).
23. E. B. Lindgren, A. J. Stace, E. Polack, Y. Maday, B. Stamm, and E. Besley, *J. Comp. Phys.* **371**, 712 (2018).
24. M. Hassan and B. Stamm, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* **55**, S65 (2021).
25. B. Bramas, M. Hassan, and B. Stamm, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* **55**, S625 (2021).
26. Е. В. Гобсон, *Теория сферических и эллипсоидальных функций*, Изд-во иностр. лит., Москва (1952) [E. W. Hobson, *The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics*, University Press, Cambridge (1931)].
27. Э. Т. Уиттекер, Д. Н. Ватсон, *Курс современного анализа, ч. 2, Трансцендентные функции*, Физматгиз, Москва (1963).
28. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика, т. VIII, Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982) [L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, Vol. 8, Pergamon Press, Oxford (1984)].

- 29. N. Sato, AIP Conf. Proc. **799**, 97 (2005).
- 30. S. I. Krasheninnikov, Phys. Plasmas **13**, 114502 (2006).
- 31. S. I. Krasheninnikov, V. I. Shevchenko, and P. K. Shukla, Phys. Lett. A **361**, 133 (2007).
- 32. V. Y. Karasev, E. S. Dzlieva, A. I. Eikhval'd, M. A. Ermolenko, M. S. Golubev, and A. Y. Ivanov, Phys. Rev. E **79**, 026406 (2009).
- 33. S. I. Krasheninnikov, R. D. Smirnov, and D. L. Rudakov, Plasma Phys. Control. Fusion **53**, 083001 (2011).
- 34. Е. С. Дзлѣѣѡѡ, В. Ю. Карасев, О. Ф. Петров, ЖЭТФ **14**, 189 (2012)
- 35. V. Y. Karasev, E. S. Dzlieva, S. I. Pavlov, L. A. Novikov, and I. C. Mashek, Technical Phys. **64**, 42 (2019).
- 36. L. Simons and A. Long, Phys. Plasmas **28**, 093702 (2021).
- 37. S. Ratynskaia, A. Bortolon, and S. I. Krasheninnikov, Rev. Mod. Plasma Phys. **6**, 1 (2022).
- 38. M. E. Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York (1957).

ГЕНЕРАЦИЯ ПРОДОЛЬНОГО УЛЬТРАЗВУКА ИМПУЛЬСАМИ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ В РЕЖИМЕ СПИН-ФОНОННОГО ЭХА

*С. В. Сазонов**

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)
125993, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 сентября 2022 г.,
после переработки 10 сентября 2022 г.
Принята к публикации 26 сентября 2022 г.

Предсказана возможность генерации импульсов продольного ультразвука гигагерцевых частот в режиме спин-фононного эха с помощью воздействия на намагниченный изотропный парамагнетик резонансными наносекундными импульсами сдвиговой деформации. Частота генерируемых эхо-сигналов продольного ультразвука в два раза превышает частоту импульсов, подаваемых на среду. Для реализации эффекта скорость продольного ультразвука не должна более чем в два раза превышать скорость волн деформации сдвига. Данный резонансный механизм импульсного режима генерации второй гармоники, сопровождающегося нелинейным преобразованием поперечного ультразвука в продольный, не имеет оптического аналога.

DOI: 10.31857/S0044451023030045

EDN: QDIKKL

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытие в 1950 г. Эрвином Ханом спинового эха [1] стимулировало предсказание [2] и экспериментальное наблюдение [3] аналогичного резонансного эффекта в видимом диапазоне электромагнитных волн — фотонного (светового) эха. Затем вышла серия экспериментальных и теоретических работ по спин-фононному (акустическому) эху в парамагнитных кристаллах [4–9], помещенных во внешнее магнитное поле. В. Квантовые переходы между зеемановскими подуровнями парамагнитных ионов могут быть инициированы как акустическими, так и электромагнитными полями. В свою очередь, данные переходы способны генерировать поля той и другой природы. В работах [5–7] рассматривалось комбинированное (акусто-электромагнитное) воздействие

на парамагнитные кристаллы, а также регистрировались акустические и электромагнитные эхо-сигналы.

Для наблюдения сигналов спин-фононного эха важно, чтобы характерные частоты ω_0 зеемановского расщепления значительно превышали соответствующие неоднородные ширины $\delta\omega$ образовавшихся в результате данного расщепления переходов. Обычно при температурах жидкого гелия $\delta\omega \sim 10^7\text{--}10^8\text{ с}^{-1}$ [10]. Поэтому в экспериментах по спин-фононному эху используются сильные магнитные поля, вызывающие зеемановские расщепления с частотами $\omega_0 \sim 10^{11}\text{ с}^{-1}$ [10, 11]. Тот же порядок имеют несущие частоты ω акустических импульсов, резонансно взаимодействующих с квантовыми переходами между зеемановскими подуровнями. Таким образом, спектры возбуждающих акустических импульсов и акустических эхо-сигналов лежат в гигагерцевом диапазоне частот, принадлежащем дальнему ультразвуку.

В твердом теле способны формироваться и распространяться как продольные, так и поперечные

* E-mail: sazonov.sergey@gmail.com

акустические волны. Последние называют также импульсами сдвиговой деформации. Данное обстоятельство коренным образом отличает акустические волны от электромагнитных. Комбинированное воздействие на кристаллы поперечными и продольными акустическими импульсами способно порождать такие же комбинированные эхо-отклики. Важным представляется то, что скорости продольных и поперечных упругих волн в твердом теле существенно различаются между собой. Это может привносить свои особенности в акустическое (спин-фононное) эхо, отсутствующие в случаях спинового и фотонного эха.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию возможности формирования эхо-откликов продольного ультразвука при резонансном возбуждении парамагнитного кристалла ультразвуковыми импульсами сдвиговой деформации.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Внедренные в твердое тело парамагнитные ионы характеризуются эффективным спином S [12], значением которого определяется количество образовавшихся зеемановских подуровней из наиболее заселенного квантового состояния после помещения данных ионов в магнитное поле.

Наиболее сильное спин-фононное взаимодействие с динамическими локальными деформациями твердого тела испытывают парамагнитные ионы, обладающие эффективным спином $S = 1$ [12]. Согласно механизму Ван Флека [11, 12], локальные деформации приводят к появлению локальных градиентов внутреннего электрического поля. В свою очередь, данные градиенты вызывают электрические квадрупольные переходы между зеемановскими подуровнями парамагнитных ионов. Гамильтониан спин-фононного взаимодействия в таком случае имеет вид [10–12]

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=x, y, z} G_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu} (\hat{S}_\mu \hat{S}_\nu + \hat{S}_\nu \hat{S}_\mu), \quad (1)$$

где $G_{\mu\nu}$, $\varepsilon_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu} \right)$ — компоненты тензоров спин-фононной связи и локальной деформации соответственно, u_μ — проекция вектора u локальных смещений на декартову координату x_μ , $\hat{S}_\mu$ — трехрядные спиновые матрицы, в представлении соб-

ственных функций оператора $\hat{S}_z$ имеющие вид [12]

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2)$$

Спиновый гамильтониан свободного от спин-фононного взаимодействия выделенного парамагнитного иона имеет вид

$$\hat{H}_s = \hbar \omega'_0 \hat{S}_z, \quad (3)$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, ω'_0 — частота зеемановского расщепления спинового состояния.

Основное, среднее и верхнее состояния эффективного спина обладают соответственно проекциями $S_z = -1, 0, +1$ на ось z (рис. 1).

Ниже будем считать, что подаваемые на среду импульсы сдвиговой деформации поляризованы вдоль внешнего магнитного поля B , направленного параллельно оси z , и характеризуются компонентой $\varepsilon_{zx} = 0.5 \partial u_z / \partial x$ тензора упругой деформации. Данную компоненту будем считать заданной, пренебрегая обратным воздействием на нее парамагнитных

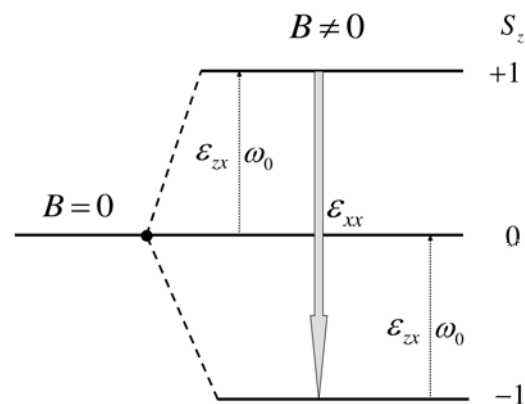


Рис. 1. Расщепление квантового уровня на три зеемановских подуровня парамагнитного иона с эффективным спином $S = 1$ и разрешенные спин-фононные переходы для волн поперечного и продольного ультразвука, характеризующихся соответственно компонентами ε_{zx} и ε_{xx} тензора относительной деформации

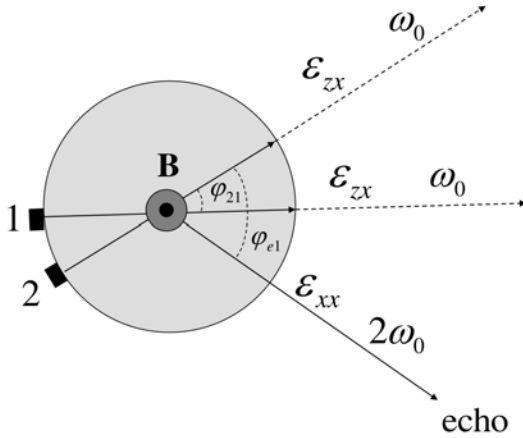


Рис. 2. Геометрическая схема возбуждения парамагнитного цилиндра импульсами сдвиговой деформации ε_{zx} с несущей частотой ω_0 и «высвечивания» эхо-сигнала продольного ультразвука ε_{xx} с несущей частотой $2\omega_0$. Черными прямоугольниками с номерами 1 и 2 обозначены соответственно генераторы первого и второго возбуждающих импульсов сдвиговой деформации. Магнитное поле B и ось симметрии цилиндрического парамагнитного образца перпендикулярны к плоскости рисунка

ионов. Такой подход, типичный при исследовании эффектов эха, оправдан при условии $\alpha l \ll 1$, где α — коэффициент поглощения поперечного ультразвука, l — характерный размер твердотельного образца, на который данный ультразвук воздействует. Кроме того, примем, что как воздействующие на образец импульсы, так и эхо-сигнал распространяются перпендикулярно магнитному полю (рис. 2). При этом поле продольного эхо-сигнала, распространяющегося вдоль оси x , характеризуется компонентой тензора деформаций. В соответствии со сказанным при учете аксиальной симметрии относительно вращений вокруг оси, параллельной B , представим (1) в виде суммы

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{int}^{\perp} + \hat{H}_{int}^{\parallel}, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}^{\perp} &= \frac{1}{2} G_{\perp} \varepsilon_{zx} (\hat{S}_x \hat{S}_z + \hat{S}_z \hat{S}_x), \\ \hat{H}_{int}^{\parallel} &= G_{\parallel} \varepsilon_{xx} \hat{S}_x^2, \\ G_{\perp} &= G_{zx}, \quad G_{\parallel} = G_{xx}. \end{aligned} \quad (5)$$

Так как на парамагнитные ионы воздействуют только импульсы сдвиговой деформации, то в уравнение для матрицы плотности $\hat{\rho}$ данных ионов входит часть гамильтониана, равная $\hat{H}_s + \hat{H}_{int}^{\perp}$.

В соответствии со значениями проекций эффективного спина на ось z для различных квантовых

состояний парамагнитного иона (рис. 1), матрицу плотности представим в виде

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+0} & \rho_{+-} \\ \rho_{0+} & \rho_{00} & \rho_{0-} \\ \rho_{-+} & \rho_{-0} & \rho_{--} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Здесь нижние индексы $+$, 0 и $-$ обозначают соответственно проекции эффективного спина $+1$, 0 и -1 . При этом выполняются условия эрмитовости $\rho_{+0} = \rho_{0+}^*$, $\rho_{+-} = \rho_{-+}^*$, $\rho_{0-} = \rho_{-0}^*$ и нормировки $\rho_{++} + \rho_{00} + \rho_{--} = 1$.

Используя (2), (5) и (6), запишем уравнения для элементов $\rho_{\mu\nu}$ ($\mu, \nu = -, 0, +$) матрицы плотности в виде

$$\frac{\partial \rho_{\mu\nu}}{\partial t} = i\omega'_{\nu\mu} \rho_{\mu\nu} - \frac{i}{\hbar} [H_{int}^{\perp}, \hat{\rho}]_{\mu\nu}. \quad (7)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \omega'_{+0} &= \omega'_{0-} = \omega'_0, \\ \omega'_{+-} &= 2\omega'_0, \\ \omega'_{++} &= \omega'_{00} = \omega'_{--} = 0. \end{aligned}$$

Здесь и ниже мы пренебрегаем энергетической и фазовой необратимыми релаксациями, считая, что характерное время Δt проведения эксперимента значительно меньше характерных времен обоих видов релаксации.

Применяя для расчета параметров эхо-сигнала полуклассический подход, дополним (4) и (5) классическим гамильтонианом поля продольной деформации $H_a = \int H_a d^3r$, где интегрирование ведется по всему объему образца среды, а плотность гамильтониана H_a определяется выражением

$$H_a = \frac{p_x^2}{2\rho} + \frac{\rho}{2} a_{\parallel}^2 \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2, \quad (8)$$

где ρ — равновесная плотность среды, p_x — декартова компонента плотности импульса продольных локальных смещений, $a_{\parallel}$ — скорость продольного звука в рассматриваемой среде.

Используем уравнения Гамильтона для механики сплошных сред [13]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_x}{\partial t} &= -\frac{\delta}{\delta u_x} (H_a + \langle \hat{H}_{int}^{\parallel} \rangle), \\ \frac{\partial u_x}{\partial t} &= \frac{\delta}{\delta p_x} (H_a + \langle \hat{H}_{int}^{\parallel} \rangle). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\langle \hat{H}_{int}^{\parallel} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{H}_{int}^{\parallel})$ — квантовое среднее оператора Гамильтона, описывающего взаимодействие эффективного спина с полем продольных де-

формаций.

Отсюда, а также из (2), (5), (6) и (8) приходим к волновому уравнению

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial t^2} - a_{\parallel}^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial x^2} = \frac{n G_{\parallel}}{2\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (\rho_{00} + \rho_{-+} + \rho_{-+}^*) g(\Delta) d\Delta, \quad (10)$$

где n — концентрация парамагнитных ионов, $g(\Delta)$ — функция контура неоднородного уширения на квантовом переходе $- \leftrightarrow +$, центрированная на частоте ω_0 , $\Delta = \omega'_0 - \omega_0$ — отстройка квантового перехода $- \leftrightarrow +$ выделенного парамагнитного иона от центральной частоты спектральной линии.

Таким образом, в принятом приближении $\alpha l \ll 1$ возбуждение парамагнитных ионов происходит импульсами сдвиговой деформации, что описывается последним слагаемым в (7). В свою очередь, продольный ультразвук генерируется квантовым переходом $- \leftrightarrow +$ в периоды свободной эволюции спинов, когда в (7) можно положить $H_{int}^{\perp} = 0$. Этот процесс описывается динамикой элемента ρ_{-+} матрицы плотности. Что касается матричного элемента ρ_{00} , то его динамика в периоды свободной эволюции описывается энергетической релаксацией, которой мы здесь, как было сказано выше, пренебрегаем. Поэтому в правой части (10) можно с хорошей точностью считать $\rho_{00} = \text{const}$.

Используем далее стандартное приближение медленно меняющихся амплитуд (ММА) [14]. В периоды возбуждений для динамических переменных поля и среды имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zx} &= \psi_{\perp} e^{i(\omega_0 t - \mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r})} + \text{с. с.}, \\ \rho_{-+} &= R_{-+} e^{i(2\omega_0 t - \mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r})}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \rho_{-0} &= R_{-0} e^{i(\omega_0 t - \mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r})}, \\ \rho_{0+} &= R_{0+} e^{i(\omega_0 t - \mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r})}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\psi_{\perp}$ и $R_{\mu\nu}$ — комплексные ММА импульсов сдвиговой деформации и недиагональных элементов матрицы плотности соответственно ($\mu, \nu = -, 0, +$), $\mathbf{k}_{\perp}$ — волновой вектор импульсов сдвиговой деформации, несущая частота ω_0 данных импульсов совпадает с центральной частотой контуров неоднород-

ного уширения для переходов $- \leftrightarrow 0$ и $0 \leftrightarrow +$, r — радиус-вектор точки парамагнетика.

Для периодов свободной эволюции ($H_{int}^{\perp} = 0$) запишем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \psi_{\parallel} e^{i(2\omega_0 t - \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r})} + \text{с. с.}, \\ \rho_{-+} &= R_{-+} e^{i(2\omega_0 t - \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r})}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\psi_{\parallel}$ и $\mathbf{k}_{\parallel}$ — комплексная ММА и параллельный оси x волновой вектор продольного ультразвука соответственно.

Матричные элементы ρ_{-0} и ρ_{0+} здесь по-прежнему представляются в виде (12).

Отметим, что величины волновых векторов для волн сдвиговой деформации и продольного ультразвука определяются соответственно выражениями $k_{\perp} = \omega_0/a_{\perp}$, $k_{\parallel} = 2\omega_0/a_{\parallel}$, где $a_{\perp}$ — скорость поперечного ультразвука.

Будем считать ниже, что длительности τ_p воздействующих импульсов значительно меньше времен T_{0+}^* , T_{-0}^* и T_{-+}^* обратимой релаксации, обусловленной неоднородным уширением рассматриваемых квантовых переходов. Как результат, ширины $\delta\omega_p \sim 1/\tau_p$ импульсных спектров значительно превышают неоднородные ширины $\delta\omega \sim 1/T_{0+}^*$, $1/T_{-0}^*$, $1/T_{-+}^*$ данных переходов. Поэтому при описании возбуждения парамагнитных ионов пренебрежем в (7) частотными отстройками $\omega'_{\nu\mu} - \omega_{\nu\mu}$ от соответствующих резонансов.

Суммируя сказанное выше, из (2), (5)–(7), (10)–(13) после пренебрежения в материальных уравнениях быстро осциллирующими слагаемыми для периодов возбуждения парамагнитных ионов получим

$$\frac{\partial \hat{R}}{\partial t} = i \frac{G_{\perp} \psi_{\perp}}{2\sqrt{2}\hbar} [\hat{R}, \hat{Q}], \quad (14)$$

где

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} \rho_{++} & R_{+0} & R_{+-} \\ R_{0+} & \rho_{00} & R_{0-} \\ R_{-+} & R_{-0} & \rho_{--} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В дальнейшем заданную амплитуду $\psi_{\perp}$ будем считать вещественной.

Для периодов свободной эволюции из (7), (10), (12) и (13) будем иметь $\rho_{--} = \rho_{00} = \rho_{++} = \text{const}$,

$$\frac{\partial R_{-0,0+}}{\partial t} = i\Delta R_{-0,0+}, \quad \frac{\partial R_{-+}}{\partial t} = 2i\Delta R_{-+}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \psi_{\parallel}}{\partial x} + \frac{1}{a_{\parallel}} \frac{\partial \psi_{\parallel}}{\partial t} = i \frac{n G_{\parallel} \omega_0}{2 \rho a_{\parallel}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} R_{-+} g(\Delta) d\Delta. \quad (17)$$

С помощью системы (14), (15) определяются квантовые состояния парамагнитных ионов при воздействии на них резонансных импульсов сдвиговой деформации. Уравнениями (16), (17) описывается генерация продольного ультразвука после данного воздействия.

3. РЕЖИМ СПИН-ФОНОННОГО ЭХА

Рассмотрим динамику квантовых состояний парамагнитных ионов в периоды возбуждений, получив решение операторного уравнения (14).

Решение операторного уравнения (14) можно записать в виде

$$\hat{R}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{R}(t_0) \hat{U}^+(t, t_0), \quad (18)$$

где

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{S}}, \quad \hat{S} = \hat{Q} \frac{G_{\perp}}{2\sqrt{2}\hbar} \int_{t_0}^t \psi_{\perp} dt', \quad (19)$$

t_0 — время начала воздействия импульса.

Разлагая в ряд Тейлора экспоненту от матрицы $e^{i\hat{S}}$, после его суммирования с учетом (19) и второго выражения (15) будем иметь для оператора эволюции

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} - \hat{Q}^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - i \frac{\hat{Q}}{\sqrt{2}} \sin \theta, \quad (20)$$

где $\hat{I}$ — единичная матрица,

$$\theta = \frac{G_{\perp}}{2\hbar} \int_{t_0}^t \psi_{\perp} dt'. \quad (21)$$

Для периодов свободной эволюции из (16) находим

$$R_{-0,0+}(t) = R_{-0,0+}(t_1) \exp \{i\Delta(t - t_1)\}, \quad (22)$$

$$R_{-+}(t) = R_{-+}(t_1) \exp \{2i\Delta(t - t_1)\},$$

где t_1 — время начала этапа свободной эволюции.

Пусть в момент времени $t = 0$ на среду воздействует импульс сдвиговой деформации длительности τ_1 . Затем, спустя промежуток времени τ , соответствующий первому этапу свободной эволюции, среда подвергается воздействию второго импульса, длительность которого равна τ_2 . После этого, при $t = \tau + \tau_1 + \tau_2$, начинается второй этап свободной эволюции, во время которого формируются эхосигналы (рис. 3).

Будем считать, что при $t = 0$ матрица $\hat{R}$ определяется только начальными населенностями w_+ , w_0 и w_- соответствующих спиновых состояний парамагнитных ионов и имеет вид

$$\hat{R}(0) = \begin{pmatrix} w_+ & 0 & 0 \\ 0 & w_0 & 0 \\ 0 & 0 & w_- \end{pmatrix}.$$

Тогда, применяя в обозначенной последовательности формулы (18), (20)–(22), найдем выражения для элементов матрицы $\hat{R}$ в моменты времени $t > \tau + \tau_1 + \tau_2$. Интересующая нас часть R_{-+}^{echo} элемента R_{-+} , вносящая вклад в эхо-отклик, имеет вид

$$R_{-+}^{echo} = R_{-+}^{3\tau/2} + R_{-+}^{2\tau}, \quad (23)$$

где

$$R_{-+}^{3\tau/2} = -\frac{w_- - 2w_0 + w_+}{4} \sin 2\theta_1 \times$$

$$\times \sin \theta_2 \sin^2 \frac{\theta_2}{2} e^{2i\Delta(t - 3\tau/2 - \tau_1 - \tau_2)}, \quad (24)$$

$$R_{-+}^{2\tau} = \frac{w_- - 2w_0 + w_+}{4} \sin^2 \theta_1 \sin^4 \frac{\theta_2}{2} e^{2i\Delta(t - 2\tau - \tau_1 - \tau_2)}. \quad (25)$$

Здесь

$$\theta_1 = \frac{G_{\parallel}}{2\hbar} \int_0^{\tau_1} \psi_{\perp} dt', \quad \theta_2 = \frac{G_{\parallel}}{2\hbar} \int_{\tau+\tau_1}^{\tau+\tau_1+\tau_2} \psi_{\perp} dt'$$

— «площади» соответственно первого и второго возбуждающих импульсов.

В эхо-экспериментах с хорошей точностью выполняется неравенство $\tau \gg \tau_1, \tau_2$. Учитывая это, а также больцмановский характер распределения начальных населенностей спиновых подуровней, после интегрирования по лоренцевскому контуру неодно-

родного уширения перехода $-\leftrightarrow +$

$$g(\Delta) = \frac{1}{\pi} \frac{T_{-+}^*}{1 + (T_{-+}^* \Delta)^2}$$

будем иметь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R_{-+}^{3\tau/2} g(\Delta) d\Delta = -0.5 \frac{\text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) - 1}{2 \text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) + 1} \sin 2\theta_1 \sin \theta_2 \sin^2 \frac{\theta_2}{2} \exp \left\{ -\frac{2}{T_{-+}^*} \left| t - \frac{3\tau}{2} \right| \right\}, \quad (26)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R_{-+}^{2\tau} g(\Delta) d\Delta = -0.5 \frac{\text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) - 1}{2 \text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) + 1} \sin^2 \theta_1 \sin^4 \frac{\theta_2}{2} \exp \left\{ -\frac{2}{T_{-+}^*} |t - 2\tau| \right\}, \quad (27)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура среды.

Выражениями (26) и (27) описываются появления ультразвукового эхо-сигнала в моменты времени $3\tau/2$ и 2τ соответственно (рис. 3).

Взяв за начало координаты x центр цилиндрического парамагнитного образца (рис. 2), запишем решение уравнения (17) при $x \gg l$. При этом будем считать, что среда вне цилиндрического образца не обладает парамагнитными свойствами. Тогда с учетом (26) и (27) для $3\tau/2$ - и 2τ -эха найдем

$$\begin{aligned} \psi_{\parallel}^{3\tau/2} &= -i\mu \sin 2\theta_1 \sin \theta_2 \sin^2 \frac{\theta_2}{2} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{2}{T_{-+}^*} \left| t - 3\tau/2 - x/a_{\parallel} \right| \right\}, \\ \psi_{\parallel}^{2\tau} &= i\mu \sin^2 \theta_1 \sin^4 \frac{\theta_2}{2} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{2}{T_{-+}^*} \left| t - 2\tau - x/a_{\parallel} \right| \right\}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\mu = \frac{nG_{\parallel}\omega_0 l}{4\pi a_{\parallel}^3} \frac{\text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) - 1}{2 \text{ch}(\hbar\omega_0/k_B T) + 1}. \quad (29)$$

Важным является вопрос о направлении распространения эхо-сигналов. Так как характерные длины волн λ возбуждающих импульсов и сигналов эха значительно меньше размеров среды, то важную роль играют эффекты пространственной интерференции, сопровождающиеся сильной дифференциацией мод. Волновые векторы $3\tau/2$ - и 2τ -сигналов эха, как следует из общих формул, найденных в [15], определяются соответственно выра-

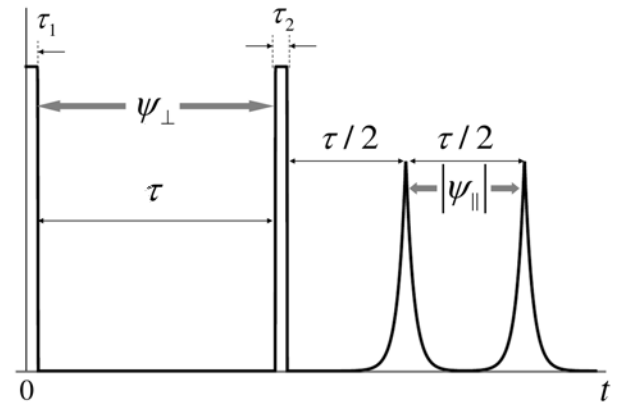


Рис. 3. Временная последовательность воздействия на парамагнетик двух импульсов сдвиговой деформации с огибающей $\psi_{\perp}$ и длительностями τ_1 и τ_2 , разделенных промежутком времени τ , а также появления двух эхо-сигналов продольного ультразвука с величиной огибающей $|\psi_{\parallel}|$

жениями $\mathbf{k}_e^{3\tau/2} = 3\mathbf{k}_2/2 - \mathbf{k}_1/2$ и $\mathbf{k}_e^{2\tau} = 2\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$. Заметим, что выражение для $\mathbf{k}_e^{2\tau}$ в точности совпадает с соответствующим выражением для фотонного эха в двухуровневой системе [3, 14]. Отсюда, учитывая, что $k_e^{3\tau/2} = k_e^{2\tau} = k_{\parallel} = 2\omega_0/a_{\parallel}$ и $k_1 = k_2 = k_{\perp} = \omega_0/a_{\perp}$, легко определить угол φ_{21} между направлениями распространения первого и второго возбуждающих импульсов, а также угол φ_{e1} между направлениями распространения первого импульса и эхо-отклика (рис. 2). Для $3\tau/2$ -эха и 2τ -эха имеем соответственно

$$\begin{aligned} \cos \varphi_{21}^{3\tau/2} &= \frac{1}{3} \left(5 - 8 \frac{a_{\perp}^2}{a_{\parallel}^2} \right), \\ \cos \varphi_{e1}^{3\tau/2} &= \frac{a_{\parallel}}{a_{\perp}} - 2 \frac{a_{\perp}}{a_{\parallel}}, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned}\cos \varphi_{21}^{2\tau} &= \frac{5}{4} - \frac{a_{\perp}^2}{a_{\parallel}^2}, \\ \cos \varphi_{e1}^{2\tau} &= \frac{3a_{\parallel}}{4a_{\perp}} - \frac{a_{\perp}}{a_{\parallel}}.\end{aligned}\quad (31)$$

Простой анализ показывает, что для удовлетворения данным соотношениям необходимо выполнение условия $a_{\parallel}/a_{\perp} \leq 2$. Поскольку в твердом теле всегда $a_{\parallel} > a_{\perp}$, приходим к ограничению вида

$$1 < a_{\parallel}/a_{\perp} \leq 2. \quad (32)$$

Таким образом, скорость продольного ультразвука не должна более чем в два раза превышать скорость поперечного ультразвука. Условие (32) является необходимым для осуществления генерации продольного ультразвука импульсами сдвиговой деформации (поперечным ультразвуком) в резонансном режиме спин-фононного эха.

Из выражений (30) и (31) легко получаются неравенства $\varphi_{21}^{3\tau/2} > \varphi_{21}^{2\tau}$ и $\varphi_{e1}^{3\tau/2} > \varphi_{e1}^{2\tau}$.

Как известно, в случае первичного (двухимпульсного) фотонного эха рассмотренные углы должны быть настолько малы, чтобы удовлетворялось условие $\varphi_{e1} = 2\varphi_{21} < \sqrt{\lambda/l}$ [3, 14]. В реальных экспериментах эти углы составляют всего единицы градусов, что затрудняет пространственное разрешение возбуждающих сигналов и сигналов эха. Важно заметить, что здесь, в отличие от фотонного эха, отсутствует ограничение на величины рассмотренных углов. Связано это с различием между скоростями распространения возбуждающих импульсов и эхо-сигналов, а также с различием их несущих частот. Более того, выбрав только одно из условий синхронизма ((30) или (31)), можно наблюдать только эхо-сигнал, удовлетворяющий данному условию. Другой же эхо-сигнал при этом будет подавлен.

Приведем численные оценки для возможной реализации рассмотренного варианта спин-фононного эха в экспериментальных условиях. В качестве рабочего образца рассмотрим аморфный кристалл MgO при температурах жидкого гелия с внедренными в него парамагнитными ионами Fe^{2+} [10]. Для такого кристалла имеем $a_{\parallel}/a_{\perp} = 1.89$ [16]. Тогда из (30) и (31) будем иметь $\varphi_{21}^{3\tau/2} = 23^\circ$, $\varphi_{e1}^{3\tau/2} = 34^\circ$, $\varphi_{21}^{2\tau} = 14^\circ$, $\varphi_{e1}^{2\tau} = 27^\circ$. Таким образом, возбуждающие импульсы и импульсы эха обладают хорошей пространственной разрешимостью.

Для рассматриваемого образца с характерным размером $l \sim 1$ мм (рис. 2) в случае импульсов сдвиговой деформации имеем $\alpha l \sim 0.01\text{--}0.1 \ll 1$ [10].

Следовательно, использованное здесь приближение заданного поля для возбуждающих импульсов выполняется с хорошей точностью. Время обратимой фазовой релаксации для квантовых переходов между зеемановскими подуровнями ионов Fe^{2+} в кристалле MgO, как и характерная длительность эхо-сигналов (см. (28)), составляет $T_{-+}^* \sim 10^{-7}$ с [7, 9]. Для того чтобы удовлетворить использованному выше условию $\tau_p \ll T_{-+}^*$, длительности возбуждающих импульсов сдвиговой деформации должны быть порядка $\tau_p \sim 10^{-8}$ с. При этом временной промежуток τ между возбуждающими импульсами удовлетворяет двойному неравенству $T_{-+}^* \ll \tau \ll T_2$, где T_2 — характерное время фазовой релаксации на разрешенных спин-фононных переходах. Взяв $T_2 \sim 10^{-5}$ с⁻¹ [10, 11], примем $\tau \sim 10^{-6}$ с. Несущая частота импульсов сдвиговой деформации, равная половине частоты генерируемого ультразвукового сигнала, составляет $\omega_0 \sim 10^{11}$ с⁻¹.

Скорость продольного ультразвука в рассматриваемом рабочем образце $a_{\parallel} = 5.77 \cdot 10^5$ см/с [16]. Следовательно, характерный размер эхо-сигнала в направлении распространения составляет $\sim a_{\parallel} T_{-+}^* \sim 1$ мм. Так как данная величина сравнима с размером образца или превышает его, то эффектами распространения эхо-сигнала внутри образца можно пренебречь. Это и было сделано при получении выражений (28).

Взяв для апертуры D возбуждающих импульсов и сигналов эха $D \approx l \sim 1$ мм, найдем для характерной длины дифракционного распыливания $l_D \sim \omega_0 D^2/a_{\parallel} \sim 10^2\text{--}10^3$ см. Это значительно превосходит рассматриваемые нами пространственные масштабы и поэтому хорошо согласуется с использованным в (10), (17) и (28) одномерным приближением. Таким образом, эхо-сигналы можно фиксировать, установив соответствующие датчики, на расстояниях нескольких сантиметров от рабочего образца.

Из (28) видно, что амплитуда $3\tau/2$ -эха максимальна, если «площади» двух возбуждающих импульсов равны соответственно $\theta_1 = \pi/4$, $\theta_2 = 2\pi/3$. Аналогичные оптимальные «площади» для наблюдения 2τ -эха имеют значения $\theta_1 = \pi/2$ и $\theta_2 = \pi$. Тогда из (21) для амплитуды подаваемых на среду импульсов сдвиговой деформации имеем оценку $\psi_{\perp} \sim \hbar/G_{\perp}\tau_p \sim 10^{-5}$. Взяв, в свою очередь, в случае рассматриваемого образца $T \sim 1\text{--}4$ К, $n \sim 10^{17}$ см⁻³, $G_{\parallel} \sim 10^{-14}$ эрг [10, 11], $\rho = 3.6$ г/см³, а также приведенные выше оценки для ω_0 , $a_{\parallel}$ и l , из (28) и (29) амплитуд эхо-сигналов продольного ультразвука будем

иметь $|\psi_{\parallel}^{3\tau/2}| \sim |\psi_{\parallel}^{2\tau}| \sim 10^{-5}-10^{-6}$. Такие амплитуды относительной деформации вполне могут быть зафиксированы в условиях реального эксперимента [12].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное в настоящей работе исследование демонстрирует принципиальную возможность генерации импульсов продольного ультразвука гигагерцевого диапазона с помощью резонансных наносекундных импульсов сдвиговой деформации посредством спин-фононного эха. Так как несущая частота импульсов продольного ультразвука здесь в два раза превышает частоту подаваемых на образец поперечных импульсов, то можно говорить о резонансном механизме генерации второй гармоники. Важно заметить, что данный механизм не имеет оптического аналога по трем основным причинам. Во-первых, в трехуровневой системе не могут быть разрешены все три оптических перехода. Это запрещено правилами отбора по четности состояний. Во-вторых, генерация второй гармоники здесь сопровождается преобразованием поперечного ультразвука в продольный. Данный процесс невозможен в оптике по причине отсутствия продольных электромагнитных волн. В-третьих, как уже отмечалось в предыдущем разделе, углы «высвечивания» эхо-сигналов продольного ультразвука по отношению к направлениям распространения возбуждающих импульсов, в отличие от случая первичного фотонного эха, не являются малыми и никак не ограничены размерами рабочего образца, в котором они формируются. Это обусловлено различием несущих частот, а также скоростей продольного и поперечного ультразвуков.

Замечание об отсутствии оптического аналога представляется важным. Дело в том, что многие нелинейно-акустические эффекты предсказывались и обнаруживались в результате проведения параллелей с соответствующими оптическими явлениями [17–24].

Помимо рассмотренных здесь $3\tau/2$ - и 2τ -сигналов эха продольного ультразвука на частоте $2\omega_0$ при описанной выше схеме возбуждений среды в момент времени 2τ могут формироваться эхо-отклики сдвиговой деформации на частоте ω_0 . Однако условия синхронизма в этом случае значительно отличаются от (30) и (31), имея явное сходство с аналогичными условиями для наблюдения фотонного эха. Поэтому при выполнении (30) и (31) данные сигналы будут сильно подавлены.

Представляет интерес исследовать ультразвуковое эхо при возбуждении среды последовательно из различных комбинаций поперечных и продольных импульсов.

В настоящей работе рассмотрена ситуация, когда длительности возбуждающих импульсов значительно короче времен обратимой фазовой релаксации задействованных квантовых переходов. В этом случае временные профили эхо-сигналов представляют собой фурье-образы соответствующих контуров неоднородного уширения [25] (см., например, (28) и выражение для $g(\Delta)$). Как известно, в противоположном случае (при импульсных длительностях, превышающих времена обратимой фазовой релаксации) в оптике наблюдаются эффекты корреляции между профилями возбуждающих импульсов и сигналов эха [26–32]. В этой связи возникает вопрос о том, как аналогичные эффекты корреляции могут проявиться в случае участия в формировании ультразвукового эха поперечных и продольных импульсов. Такой вопрос является предметом отдельного рассмотрения.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. L. Hahn, Phys. Rev. **80**, 580 (1950).
2. У. Х. Копвиллем, В. Р. Нагибаров, Физ. металлов и металловед. **15**, 313 (1963).
3. N. A. Kurnit, I. D. Abella, and S. R. Hartmann, Phys. Rev. Lett. **6**, 567 (1964).
4. В. Р. Нагибаров, У. Х. Копвиллем, ЖЭТФ **52**, 936 (1967) [V. R. Nagibarov and U. Kh. Kopvillem, Sov. Phys. JETP **25**, 618 (1967)].
5. N. S. Shiren and I. G. Kazyaka, Phys. Rev. Lett. **28**, 1304 (1972).
6. D. R. Taylor and I. G. Bartlet, Phys. Rev. Lett. **30**, 96 (1973).
7. У. Х. Копвиллем, В. Р. Ризаев, ЖЭТФ **65**, 2297 (1973) [U. Kh. Kopvillem and V. R. Rizaev, Sov. Phys. JETP **38**, 1147 (1974)].
8. В. А. Голенищев-Кутузов, В. Ф. Тарасов, Н. К. Соловаров, Письма в ЖЭТФ **22**, 266 (1975) [V. A. Golenishchev-Kutuzov, N. K. Solovarov, and V. F. Tarasov, Sov. Phys. JETP Lett. **22**, 123 (1975)].
9. В. А. Голенищев-Кутузов, А. И. Сиразиев, Н. К. Соловаров, В. Ф. Тарасов, ЖЭТФ **71**, 516 (1976) [V. A. Golenishchev-Kutuzov, A. I. Siraziev, N. K. Solovarov, and V. F. Tarasov, Sov. Phys. JETP **44**, 562 (1976)].

10. N. S. Shiren, Phys. Rev. B **2**, 2471 (1970).
11. В. А. Голенищев-Кутузов, В. В. Самарцев, Н. К. Соловьев, Б. М. Хабибуллин, *Магнитная квантовая акустика*, Наука, Москва (1977).
12. Дж. Такер, В. Рэмington, *Гиперзвук в физике твердого тела*, Мир, Москва (1975) [J. W. Tucker and V. W. Rampton, *Microwave Ultrasonics in Solid State Physics*, North-Holland, Amsterdam (1972)].
13. S. V. Sazonov, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 6295 (1994).
14. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, Москва (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, John Wiley and Sons, New York (1978)].
15. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **67**, 887 (1998) [A. Yu. Parkhomenko and S. V. Sazonov, JETP Lett. **67**, 934 (1998)].
16. Г. Кайно, *Акустические волны: устройства, визуализация и аналоговая обработка сигналов*, Мир, Москва (1990) [G. Kino, *Acoustic Waves: Devices, Imaging, and Analog Signal Processing*, Prentice-Hall Inc., New Jersey (1987)].
17. Ф. В. Бункин, Ю. А. Кравцов, Г. А. Ляхов, УФН **149**, 391 (1986) [F. V. Bunkin, Yu. A. Kravtsov, and G. A. Lyakhov, Sov. Phys. — Uspekhi **29**, 607 (1986)].
18. Г. А. Денисенко, ЖЭТФ **60**, 2270 (1971) [G. A. Denisenko, JETP **33**, 1220 (1971)].
19. В. В. Самарцев, Б. П. Смоляков, Р. З. Шарипов, Письма в ЖЭТФ **20**, 644 (1974) [V. V. Samartsev, B. P. Smolyakov, and R. Z. Sharipov, JETP Lett. **20**, 296 (1974)].
20. А. А. Заболотский, ЖЭТФ **123**, 560 (2003) [A. A. Zabolotskii, JETP **96**, 496 (2003)].
21. А. А. Заболотский, Письма в ЖЭТФ **77**, 558 (2003) [A. A. Zabolotskii, JETP Lett. **77**, 464 (2003)].
22. А. Н. Бугай, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **139**, 464 (2011) [A. N. Bugay and S. V. Sazonov, JETP **112**, 401 (2011)].
23. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, ЖЭТФ **141**, 738 (2012) [S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, JETP **114**, 645 (2012)].
24. С. В. Сазонов, ЖЭТФ **144**, 1016 (2013) [S. V. Sazonov, JETP **117**, 885 (2013)].
25. Э. А. Маныкин, В. В. Самарцев, *Оптическая эхоспектроскопия*, Наука, Москва (1984).
26. С. О. Елютин, С. М. Захаров, Э. А. Маныкин, ЖЭТФ **76**, 835 (1979) [S. O. Elyutin, S. M. Zakharov, and E. A. Manykin, Sov. Phys. JETP **49**, 421 (1979)].
27. В. А. Зуйков, В. В. Самарцев, Р. Г. Усманов, Письма в ЖЭТФ **32**, 293 (1980) [V. A. Zuikov, V. V. Samartsev, and R. G. Usmanov, Sov. Phys. JETP Lett. **32**, 270 (1980)].
28. Т. В. Мосберг, Opt. Lett. **7**, 77 (1982).
29. N. W. Carlson, W. R. Babbitt, Y. S. Bai, and T. W. Mossberg, J. Opt. Soc. Amer. B **1**, 506 (1984).
30. N. W. Carlson, W. R. Babbitt, Y. S. Bai, and T. W. Mossberg, Opt. Lett. **9**, 232 (1984).
31. У. Х. Копвиллем, В. Р. Нагибаров, В. А. Пирожков, В. В. Самарцев, Р. Г. Усманов, Письма в ЖЭТФ **20**, 139 (1974) [U. Kh. Kopvillem, V. R. Nagibarov, V. A. Pirozhkov, V. V. Samartsev, and R. G. Usmanov, Sov. Phys. JETP Lett. **20**, 60 (1974)].
32. Н. В. Знаменский, С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **85**, 440 (2007) [N. V. Znamenskii and S. V. Sazonov, JETP Lett. **85**, 358 (2007)].

КРИТИЧЕСКАЯ ТОЧКА НА КРИВОЙ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА

Э. З. Валиев*

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 25 января 2022 г.,
после переработки 19 октября 2022 г.
Принята к публикации 24 октября 2022 г.

Проведен расчет диаграммы магнитного состояния в магнитном поле для ферромагнетиков с магнитным фазовым переходом первого рода. Расчет выполнен с использованием обменно-стрикционной модели ферромагнетика. Показано, что кривая магнитного фазового перехода первого рода оканчивается в критической точке (H_{cr}, T_{cr}) , подобной критической точке перехода жидкость–газ на плоскости (T, P) . Получены аналитические выражения для таких термодинамических величин, как магнитная восприимчивость, теплоемкость, сжимаемость, которые аномально возрастают в окрестности критической точки. Результаты расчета сравниваются с имеющимися экспериментальными данными для ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$, который испытывает магнитный фазовый переход первого рода.

DOI: 10.31857/S0044451023030057
EDN: QDXELD

1. ВВЕДЕНИЕ

Критическая точка на кривой фазовых переходов первого рода во внешнем поле (магнитном, электрическом) обсуждается в ряде работ довольно давно, как в монографиях по общей теории фазовых переходов [1], так и в экспериментальных и теоретических работах по изучению свойств сегнетоэлектриков [2] и магнетиков [3]. Сюда же можно отнести и некоторые наши работы [4–6].

В последнее время появились работы по исследованию магнитного фазового перехода (ФП) первого рода в квантовых магнитных системах (см. например, работы [7–10]). Так, в работе [7] построена диаграмма состояния между двумя фазами спинового льда в соединении $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. Было показано, что кривая магнитного ФП первого рода существует в ограниченном интервале температуры и магнитного поля и оканчивается в критической точке. Авторы работ [7, 8] экспериментально измерили аномальные значения магнитной восприимчивости и теплоемкости в окрестности этой критической точки. В работе [9] этот ФП был объяснен как переход жидкость –

газ в системе эффективных магнитных монополей, которые возникают в спиновом льде. Диаграмма состояния, рассчитанная в работе [9], хорошо согласуется с экспериментальными результатами [7, 8].

В работе [10] наблюдали критическую точку на плоскости (T, P) , в которой оканчивается линия магнитного ФП первого рода между двумя фазами с различными значениями магнитной энергии (димерной и дисковой (plaque) фазами) в квантовом антиферромагнетике $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. С помощью измерений теплоемкости и численных расчетов установлено, что эта критическая точка подобна точке ФП в двухмерной модели Изинга. Отметим здесь же, что в работах [7–10], как и в наших работах [4–6], отмечается аналогия критической точки на кривой магнитного ФП первого рода с критической точкой воды.

Критическая точка известна также в теории метамагнетизма коллективизированных электронов [11, 12]. Там она обозначается как T_0 и определяется как точка, в которой исчезает метамагнитный переход. Свойства многих соединений, где происходит индуцированный внешним магнитным полем магнитный ФП первого рода (например, CoS_2 , $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$, ErCo_2 и др.), можно объяснить на основе, во-первых, теории метамагнетизма коллективизированных электронов [11, 12], а,

* E-mail: valiev@imp.uran.ru

во-вторых, обменно-стрикционной модели ферромагнетиков [4–6, 13, 14], впервые предложенной в работе [13]. К сожалению, экспериментальных доказательств существования критических явлений в точке T_0 для перечисленных выше соединений нет (по крайней мере они нам не известны).

Цель нашей работы: подробный вывод аналитических формул для расчета аномальных зависимостей термодинамических величин в окрестности критической точки для ферромагнетиков с сильным магнитоупругим взаимодействием, а также сравнение результатов расчета с имеющимся экспериментом. Кроме того, мы отмечаем, что критические точки на кривой магнитного ФП первого рода могут быть разных типов, т. е. могут различаться числом физических величин, которые имеют аномалии в окрестности критической точки.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Расчет диаграммы магнитного состояния и термодинамических величин проведен с использованием одного из вариантов обменно-стрикционной модели ферромагнетика [4–6, 13, 14]. Термодинамический потенциал этой модели имеет вид

$$F = NJs^2m^2 - Nk \ln Z(x) + K_0\omega^2/2 + P\omega. \quad (1)$$

Здесь

$$Z(x) = \frac{\text{sh}(x + x/2s)}{\text{sh}(x/2s)},$$

$x = 2s(\mu H + sJm)/kT$ — отношение энергии спина атома (s) во внешнем магнитном и молекулярном полях к тепловой энергии, m — приведенная намагниченность, ω — относительное изменения объема, $J = J_0 + \gamma\omega$ — обменный интеграл, γ — постоянная магнитоупругого взаимодействия, N — число магнитных атомов в единице объема, K_0 — модуль сжатия (при $\gamma = 0$), P — давление, k и μ — соответственно постоянная Больцмана и магнетон Бора. Основной особенностью модели является зависимость обменного интеграла J от ω .

Равновесные уравнения состояния для намагниченности и объема получены из условия минимума потенциала (1) по m и ω . Эти уравнения имеют вид

$$m = B_S(x), \quad (2)$$

$$\omega = (s^2nm^2\gamma - P)K_0^{-1}. \quad (3)$$

После подстановки в формулу $J = J_0 + \gamma\omega$ выражения (3) для ω аргумент функции Бриллюэна $B_S(x)$ становится нелинейной функцией намагниченности, что приводит при $\gamma > \gamma_{cr}$ к магнитному ФП первого рода [4, 14]. С помощью выражений (1)–(3) рассчитаны температурные зависимости термодинами-

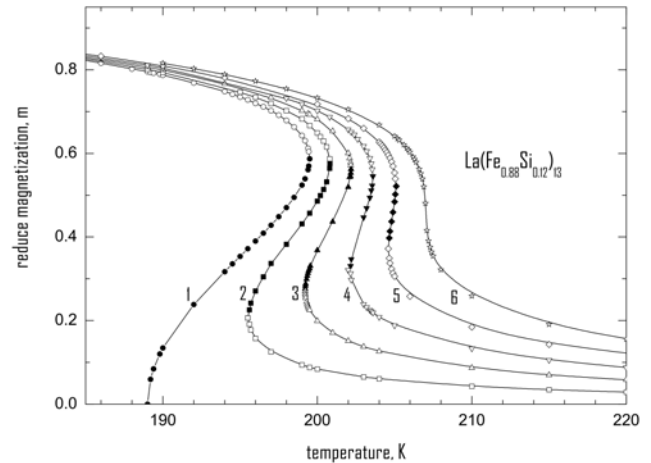


Рис. 1. Зависимость $m(T)$ при $H = \text{const}$. Кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6 соответствуют значениям магнитного поля 0, 1, 2, 3, 4, 5.16 Тл. На рисунке символами обозначены точки, рассчитанные по формуле (2). Сплошные линии проведены по этим точкам

ческих величин и параметры магнитной критической точки для ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$. Для этого ферромагнетика $\gamma_{cr} = 3.6 \cdot 10^{-13}$ эрг, а $\gamma = 4.89 \cdot 10^{-13}$ эрг. Последняя величина получена из экспериментального значения объемной магнито-стрикции $\omega_{exp} \approx 2 \cdot 10^{-2}$ ($T = 0$ К) [15] по формуле (3).

На рис. 1 представлен результат расчета зависимости $m(T)$ при постоянных значениях магнитного поля. Расчет проведен при значениях параметров для ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ из работ [11, 15–17]. Численные значения параметров приведены в Приложении. Отметим, что с этими численными значениями параметров в нашей работе [14] получено удовлетворительное количественное объяснение многих магнитных и магнитокало-рических свойств этого ферромагнетика.

Кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6 соответствуют значениям магнитного поля 0, 1, 2, 3, 4, 5.16 Тл. Для кривых 1, 2, 3, 4, 5 уравнение (2) имеет три действительных положительных решения при фиксированной температуре. Наибольшее и наименьшее по абсолютной величине значения m соответствуют ферромагнитной и парамагнитной фазам. Промежуточные значения, показанные темными символами на рис. 1, есть нефизические решения. Для них намагниченность увеличивается с ростом температуры. В точках, где начинаются и заканчиваются эти решения, происходят скачки намагниченности, характерные для ФП первого рода. Кривая 6 рассчитана при критическом значении $H_{cr} = 5.16$ Тл. При $H > H_{cr}$ ФП отсутствует и происходит непрерывный переход из ферромагнитного в парамагнитное состояние.

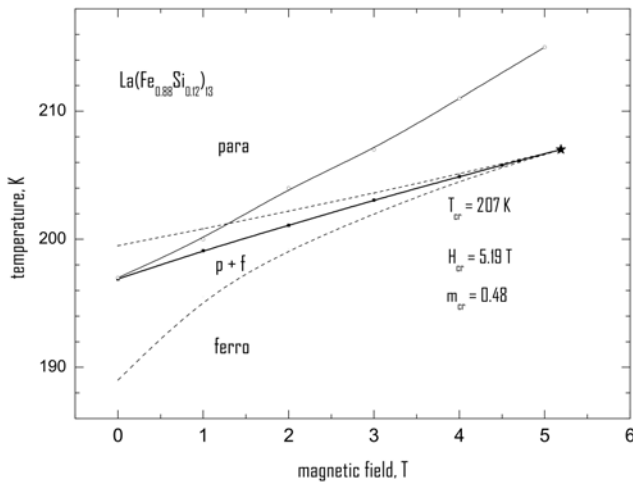


Рис. 2. Диаграмма состояния ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ в окрестности критической точки. Толстая сплошная линия проведена по точкам (темные квадраты), рассчитанным по формулам (1)–(3), тонкая сплошная — эксперимент [11]. Штрихи — спинодали парамагнитной и ферромагнитной фаз

По результатам расчета, представленным на рис. 1, и некоторым другим была рассчитана диаграмма магнитного состояния ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ в магнитном поле. Она изображена на рис. 2.

Штрихами на рис. 2 показаны спинодали (точки потери абсолютной устойчивости) парамагнитной и ферромагнитной фаз. Жирная сплошная — линия равновесных ФП первого рода. Она получена из условия равенства термодинамических потенциалов (1) для ферромагнитной и парамагнитной фаз. Звездочка — положение критической точки. Тонкая сплошная линия — экспериментальные данные работы [11]. Точки этой кривой определены как средние значения точек перегиба линий намагничивания при увеличении и уменьшении магнитного поля. Можно сказать, что совпадение результатов расчета с экспериментом удовлетворительное. Штриховым линиям на рис. 2 соответствуют точки на рис. 1, в которых $\partial m / \partial T = 0$.

Более подробная диаграмма состояния в окрестности магнитных ФП первого и второго рода в координатах T, H, P для соединения CoS_2 обсуждается в работе [6].

Для более полного описания поведения термодинамических величин в окрестности критической точки уместно привести приближенные формулы для топологического потенциала и уравнений состояния. Это позволит получить аналитические выражения для магнитной восприимчивости, сжимаемости, теплоемкости и других величин в окрестности

критической точки, а также явные выражения для параметров критической точки (T_{cr}, H_{cr}, m_{cr}).

Если разложить функцию Бриллюэна в степенной ряд и ограничиться слагаемыми не выше x^5 , то из (2) получим уравнение магнитного состояния в виде

$$Am + Bm^3 + Cm^5 = \frac{4\mu H}{3kT}, \quad (4)$$

где коэффициенты A, B, C — известные функции температуры и давления. Точные выражения для них смотрите в Приложении. Как и должно быть для ФП первого рода, $A > 0, C > 0$, а $B < 0$. Уравнению состояния (4) соответствует термодинамический потенциал

$$F = \frac{1}{2}Am^2 + \frac{1}{4}Bm^4 + \frac{1}{6}Cm^6 - \frac{4\mu mH}{3kT}. \quad (5)$$

В этом случае условия для критической точки следуют из уравнений

$$\begin{aligned} \chi_T^{-1} \sim \frac{\partial^2 F}{\partial m^2} &= A + 3Bm^2 + 5Cm^4 = 0, \\ \frac{\partial^3 F}{\partial m^3} &= 2m(3B + 10Cm^2) = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

и уравнения (4) (см., например, [1]), где

$$\chi_T = 2\mu sN \frac{\partial m}{\partial H}$$

— магнитная восприимчивость. Из уравнений (4) и (6) следуют выражения для параметров критической точки:

$$T_{cr} = \frac{T_C^0}{1 - 9B^2/20C}, \quad (7)$$

$$m_{cr}^2 = -\frac{3B}{10C}, \quad H_{cr} = 9kT_{cr}m_{cr}\frac{B^2}{50\mu C}, \quad (8)$$

где величина T_C^0 определена в Приложении. Формула (7), на самом деле, является уравнением для определения T_{cr} , так как коэффициенты B и C зависят от температуры. Решая уравнение (7), находим численное значение $T_{cr} = 211.5$ К. Из уравнений (8) получаем $m_{cr} = 0.47$, $H_{cr} = 6.2$ Тл. Эти значения согласуются (см. рис. 2) с аналогичными величинами, полученными из решения точных уравнений (2). Диаграмма магнитного состояния, рассчитанная по приближенным формулам (5), (6), показана на рис. 3. Там же показаны экспериментальные данные работы [11] (кривая 1). Отметим здесь же, что никакого обсуждения существования критической точки на плоскости (H, T) фазовой диаграммы в экспериментальных работах [11, 17] и других не проводилось. Также в этих и других работах не обсуждались и возможные особенности физических

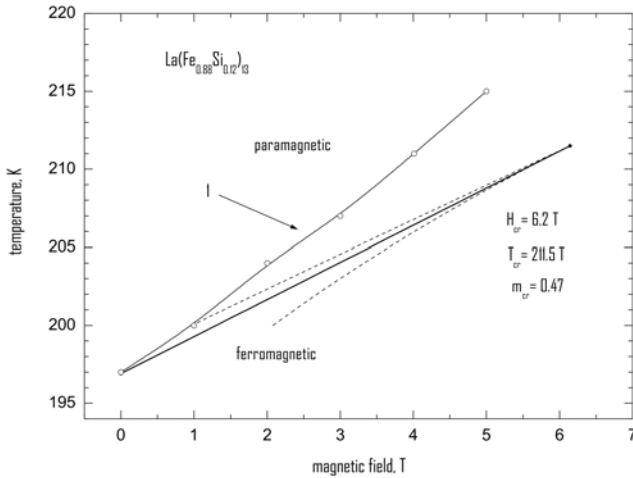


Рис. 3. Диаграмма состояния в магнитном поле для $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ (приближенный расчет). Кривая 1 — экспериментальные данные [11]. Остальные обозначения те же, что и на рис. 2

величин в окрестности этой точки. Справедливости ради надо сказать, что в работе [11] для ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ приведены численные значения точки Кюри для магнитного ФП первого рода, $T_{C1} \approx 196$ К, и температуры $T_0 \approx 230$ К, при которой исчезает метамгнитный переход. Эту критическую температуру T_0 можно рассматривать как одну из координат нашей критической точки (T_{cr} , H_{cr}), $T_0 \equiv T_{cr}$. О координате H_{cr} критической точки в упомянутой работе ничего не сказано.

Вторую координату критической точки, H_{cr} , можно оценить, если линейно экстраполировать экспериментальные кривые ФП первого рода работ [11] или [17] до температуры $T_{cr} \equiv T_0 \approx 230$ К. Тогда получим, что этой температуре соответствует $H_{cr} \approx 7$ Тл. Эти значения больше, чем рассчитанные нами (см. рис. 2 и 3). Несоответствие может быть связано как с ошибками эксперимента, так и с несовершенством нашей модели.

Используя уравнения состояния (3) и (4), несложно получить выражения для сжимаемости $K^{-1} = -(\partial\omega/\partial P)_T$ и коэффициента теплового расширения $\alpha = (\partial\omega/\partial T)_P$ (см. формулы (A.6) и (A.8)). Из этих выражений следует (см. также (6)), что магнитная восприимчивость, сжимаемость и коэффициент теплового расширения обращаются в бесконечность в критической точке. Обращается в бесконечность также теплоемкость C_H , которая согласно термодинамической формуле равна

$$C_H = C_M + \frac{T(\partial M/\partial T)_H^2}{(\partial M/\partial H)_T}, \quad (9)$$

где $M = 2\mu_s N m$.

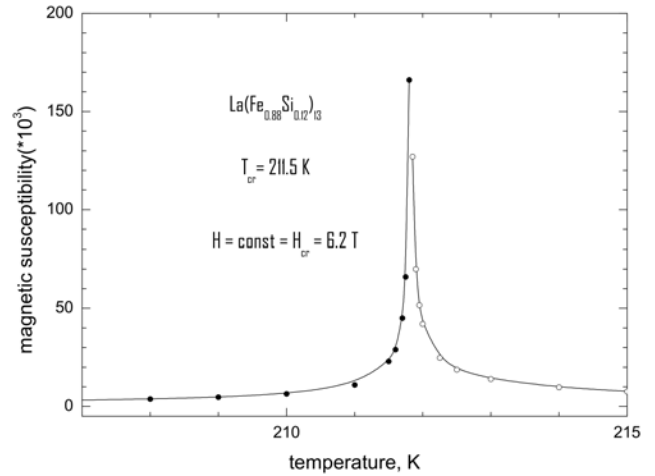


Рис. 4. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в окрестности критической точки. Расчет по формуле (A.7), см. Приложение

На рис. 4 и 5 показаны особенности зависимостей некоторых величин в окрестности критической точки. Расчет показывает, что магнитная восприимчивость принимает аномальные значения только в непосредственной окрестности критической точки (в пределах 1 К и нескольких десятых долей тесла вокруг T_{cr} и H_{cr}). В то же время магнитные вклады в коэффициент объемного расширения и модуль сжатия значительны в достаточно большом интервале температур и магнитных полей (десятки градусов Кельвина и тысячи эрстед) около T_{cr} и H_{cr} .

Восприимчивость и теплоемкость стремятся к бесконечности по закону $(T - T_{cr})^{-1}$. Приблизительно так же ведут себя сжимаемость и коэффициент теплового расширения. Таким образом, есть надежда, что в окрестности критической точки можно на десятки процентов изменять упругие свойства и раз-

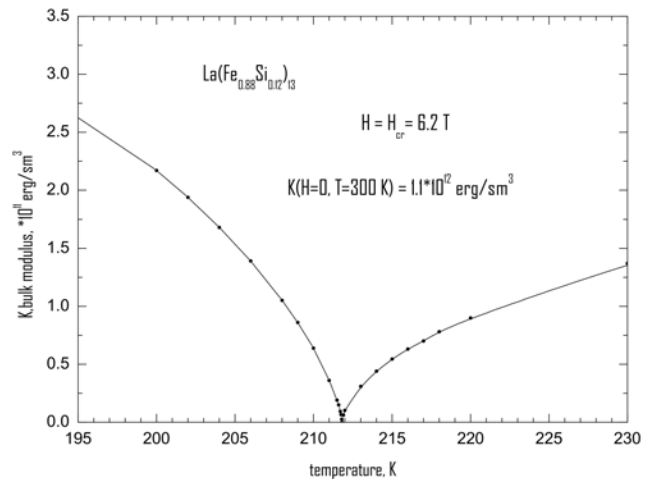


Рис. 5. Температурная зависимость модуля объемного сжатия (величина обратная сжимаемости). Расчет по формуле (A.6)

меры образца с помощью магнитного поля и температуры.

Критические точки на кривой магнитных ФП первого рода могут быть разных типов в зависимости от причин, вызывающих ФП первого рода. Так, в нашем случае причиной ФП первого рода является сильная зависимость обменного взаимодействия от межатомного расстояния (обменно-стрикционная модель [13]). Поэтому в критической точке вместе с магнитной восприимчивостью и теплоемкостью обращаются в бесконечность сжимаемость и коэффициент теплового расширения. В том случае, если причиной магнитного ФП первого рода является биквадратичное обменное взаимодействие [18, 19], то аномальными в точке Кюри будут только магнитная восприимчивость и теплоемкость.

Кроме того, из-за упомянутых выше особенностей магнитной восприимчивости и сжимаемости в окрестности критической точки для $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ должны аномально возрастать флуктуации намагниченности и атомных смещений. Эти флуктуации проявляются в магнитном и ядерном критическом рассеянии нейтронов.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Поток»).

ПРИЛОЖЕНИЕ

После подстановки $J = J_0 + \gamma\omega$ и ω из (3) выражение для x из (2) принимает вид

$$x = d + am + bm^3, \quad (\text{A.1})$$

где

$$d = \frac{2\mu s H}{kT}, \quad a = \frac{3sT_C^0(P)}{(s+1)T},$$

$$b = 2s^4 N K_0^{-1} \frac{\gamma^2}{kT},$$

$T_C^0(P) = 2s(s+1)(J_0 - K_0^{-1}P\gamma)/3k$ — зависящая от давления температура Кюри для ФП второго рода.

Разложение функции Бриллюэна в ряд с точностью до x^5 имеет вид

$$B_S(x) = Ex - Fx^3 + Gx^5, \quad (\text{A.2})$$

где

$$E = \frac{s+1}{3s}, \quad F = \frac{(2s+1)^4 - 1}{45(2s)^4},$$

$$G = 2 \frac{(2s+1)^5 - 1}{945(2s)^5}.$$

Тогда уравнение магнитного состояния принимает вид (4), где

$$A = \frac{T - T_C^0(P)}{T}, \quad B = a^3 F - Eb, \quad (\text{A.3})$$

$$C = 3Fa^2b - Ga^5.$$

При расчетах приняты следующие численные значения величин, входящих в формулы (A.1)–(A.3) (для ферромагнетика $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$): $s = 1$, $N = 6 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, $K_0 = 1.1 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2$, $\gamma = 4.89 \cdot 10^{-13} \text{ эрг}$, $T_C^0 = 189 \text{ К}$ (при $P = 0$). Эти значения определены из экспериментальных данных работ [11, 15–17] (см. также [14]). Окончательные значения T_C^0 и γ выбраны из условия совпадения рассчитанной температуры ФП первого рода с экспериментом ($T_{C1} \approx 196 \text{ К}$ [15]).

Из уравнений состояния (3) и (4) получим формулы для расчета особенностей термодинамических величин в окрестности (T_{cr}, H_{cr}) . Например, дифференцируя уравнение (3) по давлению P , получим сжимаемость

$$-\frac{\partial\omega}{\partial P} = K_0^{-1} - Ns^2m\gamma\frac{\partial m}{\partial P}, \quad (\text{A.4})$$

а из уравнения (4) следует

$$m\frac{\partial A}{\partial P} + (A + 3Bm^2 + 5Cm^4)\frac{\partial m}{\partial P} = 0,$$

и

$$\frac{\partial m}{\partial P} = -2s(s+1)m\frac{\gamma}{3kTK_0} \times$$

$$\times (A + 3Bm^2 + 5Cm^4)^{-1}. \quad (\text{A.5})$$

Тогда

$$K^{-1} \equiv -\left(\frac{\partial\omega}{\partial P}\right)_T =$$

$$= K_0^{-1} \left[1 + \frac{s^3(s+1)\gamma^2}{2\mu^2 K_0} \chi \right], \quad (\text{A.6})$$

где

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T = \frac{8\mu^2 N}{(3kT)(A + 3Bm^2 + 5Cm^4)} \quad (\text{A.7})$$

— магнитная восприимчивость при $T = \text{const}$ ($M = 2\mu s N m$).

Аналогичным способом получаем, что коэффициент теплового расширения равен

$$\alpha = \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_P \approx \frac{-8\mu s^3 \gamma m N H}{3kK_0 T^2 (A + 3Bm^2 + 5Cm^4)}. \quad (\text{A.8})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Изюмов, В. Н. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва (1984).
2. A. B. Western, A. G. Baker, C. R. Bacon et al., Phys. Rev. B **17**, 4461 (1978).
3. L. Pytlik and A. Zieba, JMMM **51**, 199 (1985).
4. Э. З. Валиев, ФММ **96**, 5 (2003).
5. Э. З. Валиев, Ф. С. Шеметьев, Письма в ЖЭТФ **79**, 535 (2004).
6. Э. З. Валиев, Ф. С. Шеметьев, ФММ **102**, 139 (2006).
7. T. Sakakibara, T. Tayama, Z. Hiroi et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 207205 (2003).
8. Aoki Hidekazu, Tashiro Sakakibara, Kazuyuki Matsuhira et al., J. Phys. Soc. Jpn **73**, 2851 (2004).
9. C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, Nature, **451**, 42 (2008).
10. J. Larrea Jimenez, S. P. G. Crone, E. Fogh et al., Nature **592**, 370 (2021).
11. A. Fujita, K. Fukamishi, M. Yamada et al., J. Appl. Phys. **93**, 7263 (2003).
12. H. Yamada, K. Fukamishi, and T. Goto, Physica B **327**, 148 (2003).
13. C. P. Bean and D. S. Rotbell, Phys. Rev. **1**, 104 (1962).
14. Э. З. Валиев, ЖЭТФ **135**, 314 (2009).
15. A. Fujita, S. Fujieda, Y. Hasegawa, and K. Fukamishi, Phys. Rev. B **65**, 0144110 (2001).
16. A. Fujita, Y. Akamatsu, and K. Fukamishi, J. Appl. Phys. **85**, 475 (1999).
17. A. Fujita, S. Fujieda, Y. Hasegawa et al., Phys. Rev. B **67**, 104416 (2003).
18. N. L. Huang and R. Orbach, Phys. Rev. Lett. **12**, 275 (1964).
19. Е. Е. Кокорина, М. В. Медведев, ФММ **122**, 1045 (2021).

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ СОЕДИНЕНИЯХ $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ($0 \leq x \leq 1$) МЕТОДОМ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Боков ^{a,b*}, М. В. Магницкая ^{a,c}, Д. А. Саламатин ^a, А. В. Цвященко ^a

^a Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук
108840, Москва, Россия

^b Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

^c Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 июня 2022 г.,
после переработки 17 августа 2022 г.
Принята к публикации 28 августа 2022 г.

Выполнены измерения магнитных сверхтонких полей H_{hf} и изомерного сдвига δ в интерметаллических соединениях $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ (структурный тип $MgCu_2$), синтезированных при высоком давлении. Значения H_{hf} , возникающие на ядрах ^{57}Fe при концентрации никеля x ниже 20 ат.%, практически не изменяются и примерно равны 22 Тл, а в интервале от $x = 0.4$ до $x = 0.98$ линейно уменьшаются с увеличением концентрации Ni . Однако линейная экстраполяция сверхтонкого поля в зависимости от концентрации Ni не приводит к его исчезновению в YNi_2 . Для YFe_2 обнаружен поворот оси легкого намагничивания от направления $[101]$ к направлению $[111]$ при повышении температуры. При увеличении концентрации Ni до $x = 0.3$ при температуре 5 К наблюдается ось легкого намагничивания $[101]$, а при $x = 0.4$ ось меняет направление на $[100]$. Из вида концентрационной зависимости сверхтонкого поля сделано предположение, что при кристаллизации $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ в условиях высоких давлений на ионах Ni существует магнитный момент. Выполнены *ab initio*-расчеты магнитных свойств и сверхтонких взаимодействий, согласующиеся с экспериментом.

DOI: 10.31857/S0044451023030069
EDN: QECCNYL

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что высокое давление уменьшает средний объем элементарной ячейки кристаллической структуры и может вызывать изменение электронной конфигурации некоторых элементов. В некоторых случаях это может приводить к образованию соединений между элементами, которые при нормальных условиях не образуются [1–4]. Например, в ранних работах [1–3] были синтезированы под давлением не известные до этого соединения щелоч-

ных и щелочноземельных элементов с магнитными 3d-металлами. Только недавно соединение в системе K–Ni, полученное в работе [1] без расшифровки структуры, было идентифицировано как K_2Ni с помощью теоретических *ab initio*-расчетов [4].

Примерно в то же время были впервые синтезированы и изучены соединения кальция с Fe, Co и Ni [2, 3]. В частности, были выполнены детальные экспериментальные и теоретические исследования непрерывного ряда псевдобинарных соединений $Ca(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ (структурный тип $MgCu_2$). В настоящей работе рассмотрен аналогичный этой системе ряд $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ и изучены его свойства. Методом эффекта Мессбауэра на ядрах ^{57}Fe исследованы сверхтонкие взаимодействия. Магнитные свойства и сверхтонкие взаимодействия рассчитаны также ме-

* E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru

тодом *ab initio*.

Топологически плотноупакованные фазы Лавеса довольно распространены среди интерметаллических соединений. Материалы на их основе используются как контейнеры для хранения водорода, как магнитомеханические датчики и приводы, а также в качестве износостойких и коррозионно-стойких покрытий в агрессивных средах и при высоких температурах [5]. Исследования этих систем, содержащих металлы группы железа, представляют интерес также для физики Земли и сходных с ней планет.

В данной работе для соединений $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$, синтезированных при высоком давлении, методом мессбауэровской спектроскопии исследована эволюция сверхтонких магнитных полей в узлах $3d$ -металлов при замещении железа (электронная конфигурация $[Ar]3d^64s^2$) никелем (электронная конфигурация $[Ar]3d^84s^2$). Мессбауэровские спектры ^{57}Fe позволяют определить изомерные сдвиги, сверхтонкие поля и направление оси легкого намагничивания в поликристалле.

Кубическая фаза Лавеса (C15, тип $MgCu_2$) соединения YFe_2 представляет собой ферримагнетик с магнитными моментами на атомах Fe, равными $1.77\mu_B$, и антипараллельными им моментами на $4d$ -атомах Y, равными $-0.67\mu_B$ [6, 7]. Соединение YNi_2 , которое образуется при нормальном давлении, кристаллизуется в сверхструктуру кубической фазы Лавеса C15 [8]. В этом соединении возникают вакансии в узлах Y (до 5–7 ат.%), упорядоченные при низких температурах. При комнатной температуре эти вакансии обладают высокой подвижностью [9]. Показано, что при высоких температурах и/или при приложении внешнего давления происходит обратимый структурный переход (типа порядок–беспорядок) в кубическую фазу Лавеса C15, связанный с разупорядочением вакансий [10]. Соединение YNi_2 в сверхструктуре кубической фазы Лавеса является паулевским парамагнетиком, что связано с низкой плотностью электронных состояний на уровне Ферми для этого соединения [11].

В работе [12] было показано, что соединения $Y_{0.95}(Fe_{1-x}Ni_x)_2$, где $x \leq 0.95$, синтезированные при нормальном давлении, кристаллизуются в кубической фазе Лавеса C15. Из температурных измерений электрического сопротивления было высказано предположение, что в соединении с $x = 0.95$ существует локальный магнетизм, связанный с короткодействующими спиновыми флуктуациями или образованием основного состояния кластерного стекла. Для соединений с $x = 0.85$ и $x = 0.75$, вероятно, имеет место дальнейшее магнитное упорядочение.

Соединения $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ для x от 0 до 1, синтезированные при высоких давлениях и температурах, по данным рентгеноструктурного анализа и намагничивания кристаллизуются в кубическую фазу Лавеса со структурой C15. Магнитный момент ионов Ni составляет $0.36\mu_B$ для всех значений x [13]. При $x = 0.35$ наблюдается аномалия зависимости постоянной решетки от состава x . Установлено также [13], что в $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ зависимость магнитного момента, приходящегося на один атом переходного металла, от числа $3d$ -электронов N_d имеет характер кривой Слэтера–Полинга, аналогично системе $Fe_{1-x}Ni_x$.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Псевдобинарные интерметаллиды $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ были получены путем воздействия высокой температуры при постоянном давлении 7.7 ГПа в камере, сконструированной Хвостанцевым и др. [14]. Детали процедуры, использованной в этих экспериментах, приведены в работе [15]. После синтеза под высоким давлением кристаллическая структура образцов соединений была определена с помощью порошковой рентгеновской дифракции. Поликристаллические образцы были однофазными и кристаллизовались в структуре кубической фазы Лавеса (C15).

Измерения эффекта Мессбауэра γ -перехода $14.4\text{ кэВ } ^{57}Fe$ проводились для серии соединений $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ с

$$x = 0; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.6; 0.7; 0.8; 0.9; 0.95; 0.98$$

при $T = 5\text{ К}$. Образцы с 2, 5 и 10 ат.% Fe обогащались изотопом ^{57}Fe до 100 %, а образцы с 20, 30 и 40 ат.% Fe обогащались ^{57}Fe до 20 %.

Спектры получены с помощью спектрометра с постоянным ускорением, описанного в работе [16]. В качестве источника γ -квантов использовали ^{57}Co в медной матрице. Отметим, что все мессбауэровские спектры измерялись при атмосферном давлении.

Программа, использующая точное аналитическое выражение для положений и интенсивностей мессбауэровских линий, была применена для определения параметров сверхтонкой структуры. Для каждого спектра, полученного от поглотителя $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ($0 \leq x \leq 1$), была сделана компьютерная подгонка с использованием метода статистической регуляризации [17]. Среднее значе-

ние сверхтонкого поля определялось из следующего соотношения:

$$\overline{H}_{hf} = \sum_{i=0}^{20} H_i P_i / \sum_{i=0}^{20} P_i,$$

где P_i — вероятность существования локального сверхтонкого поля H_i на диаграмме распределения $P_i(H_i)$.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для соединений RFe_2 (R — редкоземельный элемент) мессбауэровские исследования ^{57}Fe показали, что хотя эти соединения имеют одинаковую кристаллографическую структуру типа $C15$, они представляют несколько типов спектров [18]. В этих соединениях ионы железа, лежащие в общей сетке правильных тетраэдров с общими углами, имеют узловую симметрию $\bar{3}m$ с тремя осями, параллельными направлениям $[111]$. Позиции ионов железа ($16c$) кристаллографически эквивалентны, но в присутствии магнитного поля они магнитно-неэквивалентны, поскольку электрические квадрупольные взаимодействия зависят от угла θ между осью аксиально-симметричного градиента электрического поля и магнитным полем, которое не будет одинаковым для всех ионов железа [19]. Если вектор легкого намагничивания $\mathbf{n}$ совпадает с кристаллографическим направлением $[111]$, то существуют два магнитно-неэквивалентных узла железа с относительной заселенностью 3:1, что приводит к спектру, который представляет собой суперпозицию двух шестилинейных структур, как это наблюдается для YFe_2 , синтезированного при нормальном давлении в диапазоне температур от 1.7 K до T_C (545 K) [18]. При $\mathbf{n}$, параллельном оси $[101]$, присутствуют две магнитно-неэквивалентные позиции железа с соотношением заселенностей 1:1, как это наблюдается в $LuFe_2$ и в $SmFe_2$ [20]. При направлении вектора легкого намагничивания $\mathbf{n}$ вдоль оси $[100]$ все ионы железа эквивалентны и спектр описывается одной шестилинейной структурой.

Спектр синтезированного под высоким давлением YFe_2 , измеренный при $T = 5$ K, состоит из двух сверхтонких «шестилинеек» с соотношением интенсивностей 1:1 (рис. 1 и таблица). Это согласуется с направлением оси легкого намагничивания вдоль одного из направлений $[101]$. Однако установлено, что при $T = 300$ K ось легкого намагничивания направлена вдоль $[111]$, как это наблюдалось в об-

разце YFe_2 , приготовленном при нормальном давлении [18] (см. рис. 1 и таблицу).

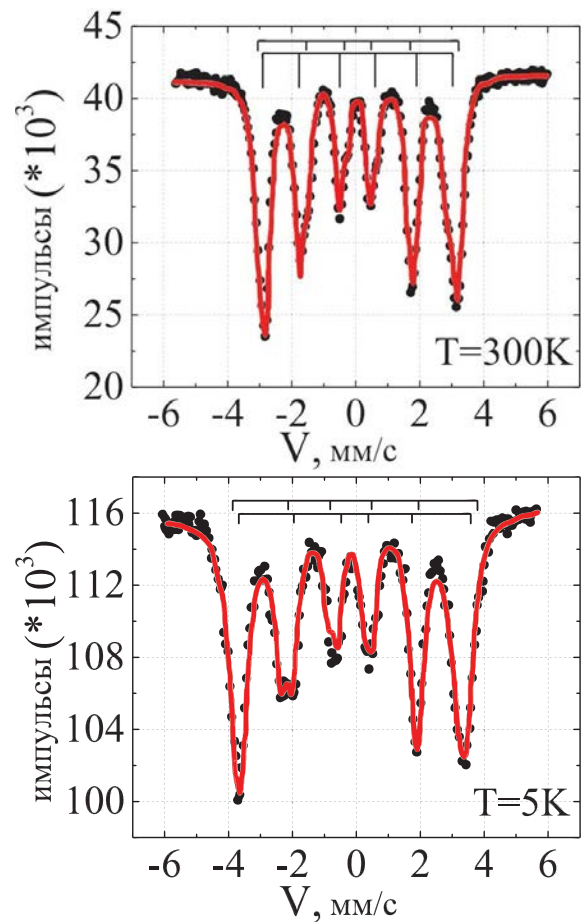


Рис. 1. Мессбауэровские спектры ^{57}Fe синтезированного под высоким давлением YFe_2 при различных температурах. Точки — экспериментальные данные, сплошные линии — аппроксимации. Метки над спектрами означают вклады от сверхтонкого магнитного расщепления

Для образцов $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ с концентрацией Ni в области $0 \leq x \leq 0.3$ ось легкого намагничивания параллельна оси $[101]$, а для $x = 0.4$ ось легкого намагничивания параллельна оси $[100]$ при $T = 5$ K. Однако при $0.2 \leq x \leq 0.4$ видно уширение линий на мессбауэровских спектрах, а при $x = 0.4$ ширина линий сильно увеличивается. Уширение может быть связано с различными вариациями локального окружения ядер ^{57}Fe . Поэтому для $0 \leq x \leq 0.98$ средние значения сверхтонкого поля определялись из компьютерных подгонок с использованием метода статистической регуляризации, который был предложен для оценки неразрешенных мессбауэровских спектров многих перекрывающихся линий [17] (рис. 2).

Таблица. Параметры сверхтонкого взаимодействия ^{57}Fe в соединении YFe_2 , синтезированном при различных давлениях (P_{synth}). H_{hf} — сверхтонкое магнитное поле (погрешность ± 0.1 Тл), ΔE — квадрупольное расщепление (погрешность ± 0.01 мм/с), δ — изомерный сдвиг относительно $\alpha\text{-Fe}$ (погрешность ± 0.01 мм/с)

P_{synth} , ГПа	T , К	Спектр I			Спектр II			Легкая ось
		H_{hf} , Тл	ΔE , мм/с	δ , мм/с	H_{hf} , Тл	ΔE , мм/с	δ , мм/с	
7.7	5	22.5	0.14	0.43	21.3	−0.17	0.34	101
7.7	300	18.7	0.19	0.13	18.2	−0.28	0.13	111
≈ 0	1.7 [18]	21.5	—	—	20.8	—	—	111
≈ 0	295 [21]	19.2	0.04	−0.18	18.5	−0.12	−0.03	111
≈ 0	300 [22]	18.0	—	—	18.9	—	—	111

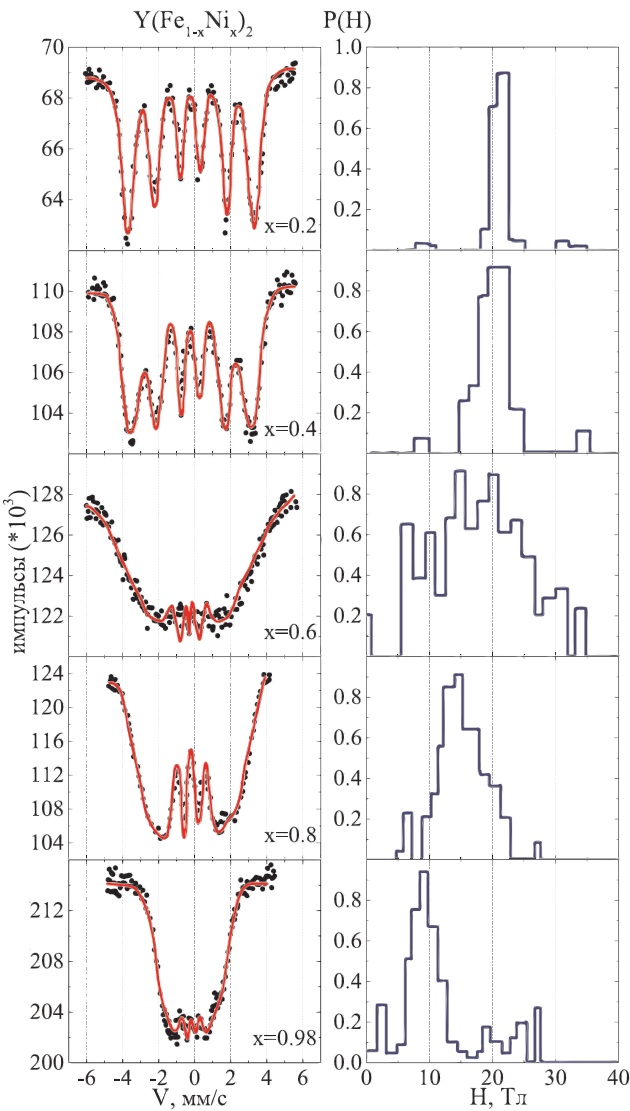


Рис. 2. (В цвете онлайн) Мессбауэровские спектры ^{57}Fe некоторых соединений $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$, измеренные при $T = 5$ К. Точки — экспериментальные данные. Сплошные красные линии и диаграмма распределений вероятностей сверхтонких полей $P(H)$ получены подгонкой

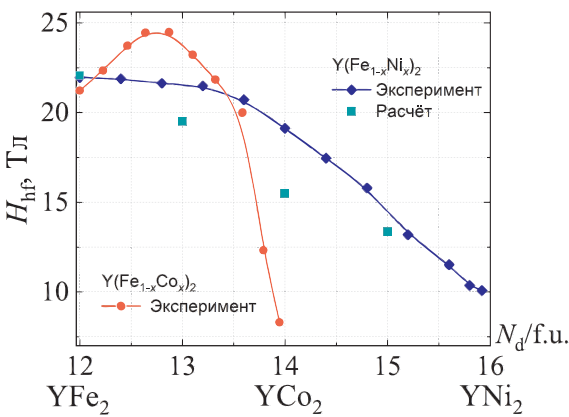


Рис. 3. (В цвете онлайн) Среднее сверхтонкое поле на ядре Fe для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ при 5 К (синяя линия — наши измерения) и для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$ при 1.7 К (красная линия — работа [6]) как функция числа 3d-электронов N_d на формульную единицу. Результаты наших расчетов показаны голубыми символами

На рис.3 средние значения сверхтонкого поля $\overline{H}_{\text{hf}}$ при $T = 5$ К представлены в зависимости от концентрации Ni. Значения $\overline{H}_{\text{hf}}$ при концентрации Ni менее 20 ат.% почти не изменились. От $x = 0.4$ до $x = 0.98$ наблюдается линейное уменьшение $\overline{H}_{\text{hf}}$. Заметим, что в системе $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$ резкое уменьшение $\overline{H}_{\text{hf}}$ было обнаружено уже при $x \geq 0.8$ (см. рис. 3) и тесно связано с исчезновением магнитного момента на атомах Co в этом ряду [18]. С другой стороны, установлено, что зависимость средней величины сверхтонкого поля на ядре железа в ряду $\text{R}(\text{Fe}_{0.02}\text{Ni}_{0.98})_2$ (где $\text{R} = \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Tb}, \text{Er}$) определяется из выражения

$$\overline{H}_{\text{hf}} = H_0 + a(g - 1)J,$$

где H_0 — постоянное сверхтонкое поле, связанное с железом, зависящее исключительно от взаимодействий Fe–Fe и Fe–Ni и равное 11(1) Тл [23]. Из наших экспериментов также следует, что для $\text{Y}(\text{Fe}_{0.02}\text{Ni}_{0.98})_2$ среднее значение сверхтонкого поля,

измеренное при 5 К, равно 10.9 Тл. Это указывает на то, что магнитное сверхтонкое поле определяется магнитным моментом Ni.

В отличие от усиленного парамагнетика Паули YCo_2 , сплав YFeNi , в котором, вероятно, должно быть такое же заполнение $3d$ -зоны, как и в YCo_2 , является ферримагнетиком [13] и имеет значение сверхтонкого поля, близкое к значению сверхтонкого поля в HoCo_2 , когда поляризующее влияние Ho приводит к возникновению момента на атомах Co, равного $1.0\mu_B$ [24, 25].

Таким образом, при воздействии, например, внешнего или внутреннего магнитного поля или давления (как в нашем случае) в $3d$ -электронной зоне сплавов $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$, вероятно, $3d$ -электроны Ni могут принимать участие в метамагнетизме коллективизированных электронов так же, как $3d$ -электрон Co в сплавах $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$ [26–28].

Из изучения сверхтонкого поля на ядре Fe в ряду сплавов $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ можно сделать вывод, что индуцированный высоким давлением электронный переход приводит к возникновению собственного магнитного момента на ионах Ni, который ответственен за большие значения сверхтонкого поля для всех значений x . При этом нужно понимать, что непрерывный ряд соединений $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ при атмосферном давлении не образуется. А получение соединений при высоком давлении в метастабильной форме связано с изменением электронных свойств Ni [29].

4. РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ *AB INITIO*

Расчеты электронных и магнитных свойств $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ проводились в рамках теории функционала электронной плотности методом присоединенных плоских волн (APW+lo), реализованным в пакете WIEN2k [30], с полулокальным приближением PBE-GGA [31] для обменно-корреляционного функционала. Использовался параметр $R_{\text{min}}K_{\text{max}} = 8.0$ и сетки k -точек Монкхорста–Пака, соответствующие разрешению в обратном пространстве около $0.15 \text{ \AA}^{-1}$. Для Y и Fe/Ni были выбраны МТ-радиусы, равные 2.50 и 2.38 радиуса Бора соответственно.

Были выполнены расчеты для концентраций x , равных 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.00. Электронная структура псевдобинарных сплавов ($x = 0.25, 0.50, 0.75$) рассчитывалась как структура гипотетических упорядоченных тройных соединений с той же стехиометрией. Для каждой концентрации x использовалась экспериментальная постоянная решетки a .

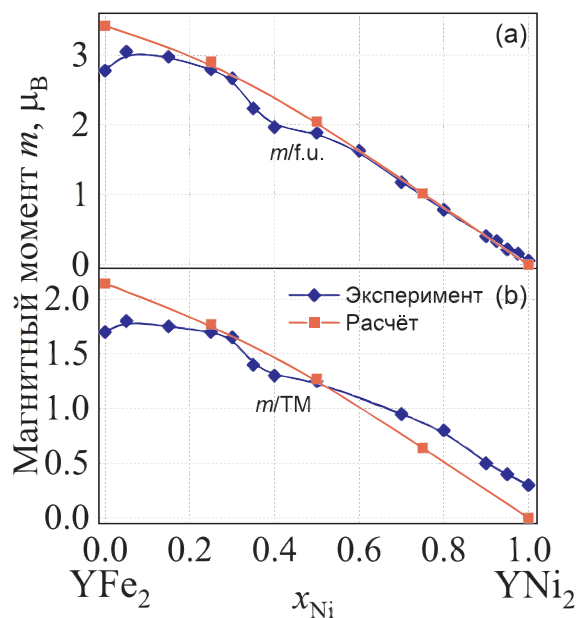


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости магнитного момента в $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ от концентрации никеля x : в расчете на формульную единицу (a) и на атом переходного металла (b). Результаты измерений [13] при 4.2 К и нашего *ab initio*-моделирования показаны синим и красным цветом соответственно

Вообще говоря, замещение Fe на Ni понижает симметрию решетки, и в результате структура тройных соединений становится не кубической, а тетрагональной. Это тетрагональное искажение довольно слабое, и структура с пониженной симметрией очень близка к исходной решетке C15. Поэтому порошковые рентгенограммы соответствующих сплавов показывают лишь небольшое уширение рефлексов C15, вызванное легированием. Однако сверхтонкое взаимодействие является локальным свойством, и его вычисленные значения очень чувствительны даже к небольшим изменениям симметрии и координат атомов. В искаженной решетке координаты атомов становятся свободными, а не строго фиксированными, как в кубической структуре C15. Поэтому для составов с $x = 0.25, 0.50, 0.75$ была выполнена релаксация положений атомов; при этом остаточные атомные силы не превышали $5 \text{ мэВ/\AA}$.

Спин-поляризованные расчеты проводились для коллинеарного расположения спинов. На рис. 4 представлена рассчитанная концентрационная зависимость магнитного момента в $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$, приходящегося на формульную единицу и на один атом переходного металла (TM). Вычисленный момент внутри сферы, окружающей атом Fe, слабо зависит от концентрации x . Момент в сфере Ni параллелен моменту Fe и для состава $\text{Y}(\text{Fe}_{1.5}\text{Ni}_{0.5})_2$

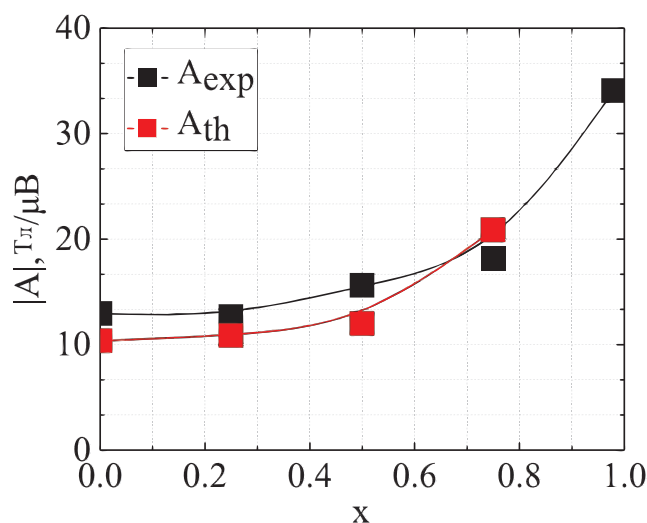


Рис. 5. Константы спаривания: A_{exp} — экспериментальные результаты, A_{th} — теоретические расчеты

равен $0.36\mu_B$, что совпадает с экспериментальным значением, найденным в работе [13]. Предполагалось [13], что момент Ni, равный $0.36\mu_B$, не меняется с увеличением x . Однако наш расчет показывает, что при увеличении x от 0.25 до 0.75 момент на Ni монотонно уменьшается до $0.13\mu_B$.

Магнитный момент в сфере Y антипараллелен моментам Fe/Ni, что подтверждает предположение [13] о ферримагнитном упорядочении в $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$. Вычисленный момент на Y изменяется монотонно примерно от $-0.3\mu_B$ для YFe_2 до $-0.1\mu_B$ для $Y(Fe_{0.5}Ni_{1.5})_2$, что отличается от значения $-0.67\mu_B$, принятого в работе [13] для всех концентраций x . Следует также отметить, что геометрия метода APW предполагает наличие магнитного момента в междоузлии, который вносит существенный вклад (в данном случае отрицательный) в полный момент элементарной ячейки. Магнитное состояние для YNi_2 оказалось неустойчивым, т. е. момент равен нулю, в отличие от результатов работы [13], где был найден момент на Ni порядка $0.3\mu_B$.

На рис. 3 показано сверхтонкое поле H_{hf} на ядре Fe в зависимости от числа d -электронов N_d на формульную единицу, которое является линейной функцией концентрации x . Это позволяет представить H_{hf} для $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ и $Y(Fe_{1-x}Co_x)_2$ на одном графике. Вычисленный изомерный сдвиг δ на ядре Fe (относительно ОЦК α -Fe) практически не зависит от концентрации и изменяется от 0.22 до 0.23 мМ/с.

Для YFe_2 рассчитанные значения сверхтонкого поля H_{hf} и изомерного сдвига δ согласуются с экспериментальными значениями для образцов, синтезированных при высоком давлении. Зависимость

$H_{hf}(x)$ также удовлетворительно согласуется с экспериментом (см. рис. 3). Что касается квадрупольного расщепления ΔE , то теоретическое значение составляет около -1.0 мМ/с для всех концентраций, что значительно превышает экспериментальные значения.

Константы спаривания между сверхтонкими полями и магнитными моментами ($A = H_{hf}/\mu_{TM}$) также рассчитаны в зависимости от концентрации x для полученных экспериментальных результатов и теоретических расчетов (рис. 5). На рисунке показано нелинейное увеличение значения A с увеличением концентрации Ni.

5. ВЫВОДЫ

Методом эффекта Мессбауэра на ядрах ^{57}Fe измерены сверхтонкие взаимодействия в соединении $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ($0 \leq x \leq 0.98$). Установлено, что экстрополяция концентрационной зависимости среднего сверхтонкого поля $\overline{H}_{hf}$ не стремится к нулю при $x \rightarrow 1$. Это свидетельствует о наличии магнитного момента у ионов Ni в ряду соединений $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$, синтезированных при высоком давлении. Для YFe_2 , синтезированного при высоком давлении, обнаружен поворот легкой оси намагничивания от направления [101] к направлению [111] с повышением температуры. При увеличении концентрации Ni до $x = 0.3$ (при температуре 5 К) наблюдается ось легкого намагничивания [101], а при $x = 0.4$ ось меняет направление на [100]. *Ab initio*-расчеты сверхтонких взаимодействий находятся в разумном согласии с экспериментом. Таким образом, образование непрерывного ряда соединений $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ связано с возникновением при высоком давлении электронного перехода из конфигурации $3d^9 4s^1$ в конфигурацию $3d^{9-y} 4s^{1+y}$ в ионах Ni, где y может изменяться с концентрацией Ni.

Благодарности. Авторы признательны В. И. Крылову за помощь в проведении эксперимента. Численные расчеты проводились с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>) и вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСП РАН).

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00806 (<https://rscf.ru/project/22-22-00806/>).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. J. Parker, T. Atou, and J. V. Badding, *Science* **273**, 95 (1996).
2. А. В. Цвященко, Л. Н. Фомичева, М. В. Магницкая и др., *Письма в ЖЭТФ* **68**, 864 (1998).
3. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, M. V. Magnitskaya et al., *The Physics of Metals and Metallography* **93**, S59 (2002).
4. A. A. Adeleke and Y. Yao, *J. Chem. Phys.* **124**, 4752 (2020).
5. F. Stein and A. Leineweber, *J. Mater. Sci.* **56**, 5321 (2021).
6. C. Ritter, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2765 (1989).
7. A. Posinger, M. Reissner, W. Steiner et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 7277 (1993).
8. V. Paul-Boncour, A. Lindbaum, M. Latroche et al., *Intermetallics* **14**, 483 (2006).
9. M. Forker, P. de la Presa, and A. F. Pasquevich, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 253 (2005).
10. E. Gratz and A. S. Markosyan, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, R385 (2001).
11. F. Z. Mohammad, S. Yehia, and S. Aly, *Int. J. Phys. and Appl.* **2**, 135 (2010).
12. O. Myakush, V. Babizhetskyy, P. Myronenko et al., *Chem. Met. Alloys* **4**, 152 (2011).
13. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, and S. D. Antipov, *J. Magn. Magn. Mater.* **98**, 285 (1991).
14. L. G. Khvostantsev, V. N. Slesarev, and V. V. Brazhkin, *High Press. Res.* **24**, 371 (2004).
15. A. V. Tsvyashchenko, *J. Less Comm. Met.* **99**, L9 (1984).
16. С. И. Рейман, Н. И. Рохлов, В. С. Шпинель и др., *ЖЭТФ* **86**, 330 (1984).
17. А. С. Меченов, *Регуляризованный метод наименьших квадратов*, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1988).
18. M. G. Luijpen, P. C. M. Gubbens, A. M. van der Kraan et al., *Physica B+C* **86–88**, 141 (1977).
19. G. J. Bowden, D. St. P. Bunbury, A. P. Guimaraes et al., *J. Phys. C* **1**, 1376 (1968).
20. K. H. J. Buschow, *Rep. Progr. Phys.* **40**, 1179 (1977).
21. K. Itoh, K. Kanematsu, and K.-I. Kobayashi, *J. Phys. Soc. Jpn* **58**, 4650 (1989).
22. M. J. Besnus, P. Bauer, and J. M. Genin, *J. Phys. F* **8**, 191 (1978).
23. S. K. Arif, I. Sigalas, and D. S. T. P. Bunbury, *Phys. Stat. Sol. (a)* **41**, 585 (1977).
24. A. M. van der Kraan and P. C. M. Gubbens, *J. Phys. Colloques* **35**, C6-469 (1974).
25. R. M. Moon, W. C. Koehler, and J. Farrell, *J. Appl. Phys.* **36**, 978 (1965).
26. O. Eriksson, B. Johansson, M. S. S. Brooks et al., *Phys. Rev. B* **40**, 9519 (1989).
27. K. Yoshimura, Y. Yoshimoto, M. Mekata et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **70**, 147 (1987).
28. T. Goto, K. Fukamichi, T. Sakakibara et al., *Sol. St. Comm.* **72**, 945 (1989).
29. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, E. N. Shirani et al., *Phys. Rev. B* **55**, 6377 (1997).
30. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran et al., *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
31. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ ДОМЕННЫХ СТЕНОК В КИРАЛЬНЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

*Н. Е. Кулагин**

*Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина Российской академии наук
119071, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 июля 2022 г.,
после переработки 30 октября 2022 г.
Принята к публикации 31 октября 2022 г.

Теоретически исследована динамика доменных стенок в ферримагнетиках, в которых инвариантность относительно пространственной инверсии нарушена из-за присутствия кирального взаимодействия Дзялошинского–Мория, энергия которого линейна по градиентам спиновой плотности подрешеток. Анализ проведен на основе численного интегрирования уравнений сигма-модели, обобщенной для случая ферримагнетика вблизи точки компенсации спинов подрешеток. Показано, что в киральных ферримагнетиках, в отличие от случаев обычных ферримагнетиков или киральных ферромагнетиков, при увеличении скорости стенки возможны эффекты динамического преобразования структуры доменных стенок с образованием более сложных стенок с немонотонным поведением спиновой плотности в стенке. Эти эффекты возможны в достаточно узкой окрестности точки компенсации, и ширина этой области растет при увеличении константы взаимодействия Дзялошинского–Мория.

DOI: 10.31857/S0044451023030070

EDN: QEMESS

1. ВВЕДЕНИЕ

Статические и особенно динамические свойства доменных стенок (ДС) в магнетиках являются предметом интенсивных экспериментальных [1–4] и теоретических [5–8] исследований в связи с возможностью их применения в магнитных устройствах хранения и обработки информации [9]. Магнитные ДС представляют собой простой, но важный пример топологических солитонов и представляют интерес с точки зрения общей физики нелинейных явлений [10–12]. Динамика ДС интересна не только для стандартных материалов — ферромагнетиков (ФМ), но и для антиферромагнетиков (АФМ), в которых значение скорости ДС значительно выше и достигает десятков километров в секунду [13–17]. Такие высокие скорости определяются так называемым обменным усилением динамических параметров АФМ. Не менее важно, что для ДС в АФМ подавлены различные эффекты неустойчивости динамики ДС, ко-

торые имеют место для ДС в ФМ [18].

Недавно было показано экспериментально [19–21] и обосновано теоретически [22–24], что в образцах ферримагнетиков (Фим), близких к точке компенсации спинов подрешеток, также можно получить высокую скорость ДС, которая достигает километров в секунду. Причина этого эффекта в том, что для Фим, находящихся в непосредственной близости от точки компенсации спинов, где совпадают спиновые плотности подрешеток, возможны эффекты обменного усиления [25]. В частности, в самой точке компенсации предельная скорость движения ДС становится, как и в АФМ, чисто обменной.

Однако для нанобразцов различных магнетиков скорость движения ДС ограничена в большей степени, чем для массивных образцов или микронных пленок. Насколько нам известно, для нанопленок АФМ движение ДС с «обменными» скоростями не наблюдалось. Для Фим около точки компенсации спина наблюдались скорости до 1 км/с, в то время как теоретические оценки дают значения до 5 км/с [22–24]. Причина уменьшения скорости ДС в одноосных ФМ состоит в том, что стандартный механизм формирования предельной скорости, связан-

* E-mail: klgn@yandex.ru

ный с магнитным дипольным взаимодействием, становится неэффективным для нанопленок ФМ. Это же ограничение проявляется и для ФМ с чисто одноосной анизотропией. Оно заложено в модели, использованной авторами работы [19] для численного моделирования результатов своего эксперимента. Наличие достаточно сильной анизотропии в базисной плоскости и (или) сильного магнитного поля, перпендикулярного легкой оси магнетика, может решить эту проблему, но реализация этих механизмов для приборов магнитной наноэлектроники, использующих динамику ДС, затруднительна.

Для нанопленок киральных ФМ, в которых за счет взаимодействия Дзялошинского–Мория (ВДМ) нарушена симметрия спиновой системы относительно пространственной инверсии, предельная скорость ДС может существенно увеличиваться [26–28]. В текущем столетии обнаружено, что ВДМ может быть получено практически для всех магнетиков, если приготовить их в виде сверхтонких (толщина менее 10 нм) пленок на подложке из немагнитного металла с сильным спин-орбитальным взаимодействием. В этом случае плотность энергии ВДМ определяется формулой $D [M_z (\nabla \cdot \mathbf{l}) - (\mathbf{l} \cdot \nabla) l_z]$, где D — константа ВДМ, $\mathbf{l}$ — параметр порядка ферримагнетика (см. формулу (ref23040-eq1)), ось z выбрана перпендикулярно поверхности пленки. Таким образом, нарушение киральной симметрии является общим свойством нанопленок магнетиков, и киральные магнетики могут рассматриваться как стандартные материалы нанопленки магнетиков. Киральные ФМ, допускающие существование скирмионов (топологических солитонов малого радиуса) и ДС, интенсивно исследуются, для них получены значения скорости ДС до 1.3 км/с, что на настоящий момент является максимальным значением для всех магнетиков, за исключением АФМ [21].

Исследована теоретически динамика ДС в тонких пленках киральных ФМ при всех значениях константы ВДМ $D < D_c$, где D_c — известное критическое значение; при $D > D_c$ однородное состояние невыгодно термодинамически и энергия ДС отрицательна. Показано, что в киральных ФМ, в отличие от случаев обычных ФМ (без киральных вкладов в энергию) или киральных ФМ, динамические свойства ДС в значительной мере определяются разрушением интегрируемости соответствующей динамической задачи. Вблизи точки компенсации имеет место динамическая конверсия стандартных ДС с образованием более сложных стенок с немонотонным поведением намагниченности.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим магнетик с двумя подрешетками, плотности спина которых $\mathbf{s}_1$ и $\mathbf{s}_2$, $|\mathbf{s}_{1,2}| = s_{1,2} = \text{const}$. Для АФМ $s_1 = s_2$, а в интересующем нас случае ФМ, близкого к точке компенсации спинов подрешеток, спиновые плотности не равны, но имеют близкие значения $s_1 \approx s_2$. Динамика векторов $\mathbf{s}_1$ и $\mathbf{s}_2$ определяется системой двух уравнений Ландау–Лифшица, которые удобно переписать в терминах комбинации спиновых плотностей:

$$\mathbf{l} = \frac{\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2}{s_1 + s_2}, \quad \mathbf{m} = \frac{\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2}{s_1 + s_2}. \quad (1)$$

Наиболее простое и удобное описание динамики ФМ вблизи точки компенсации базируется на использовании так называемой обобщенной сигма-модели — замкнутого уравнения для вектора $\mathbf{l}$. Впервые это уравнение было получено для анализа АФМ (см. историю вопроса и современное состояние проблемы в обзоре [29]), но оно допускает обобщение на случай почти скомпенсированных ФМ [30, 31], см. также недавний обзор [25]. В рамках этого подхода основной динамической переменной при описании АФМ является нормированный вектор антиферромагнетизма $\mathbf{l}$, для которого получается уравнение [25]

$$\nu \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} + \frac{1}{\omega_{ex}} \left[\mathbf{l} \times \frac{\partial^2 \mathbf{l}}{\partial t^2} \right] = - \frac{1}{\hbar(s_1 + s_2)} \left[\mathbf{l} \times \frac{\delta W}{\delta \mathbf{l}} \right], \quad (2)$$

где $W = W[\mathbf{l}]$ — статическая энергия ФМ (4), записанная в виде функционала вектора $\mathbf{l}$, $\hbar\omega_{ex} = g\mu_B H_{ex}$, где H_{ex} — так называемое обменное поле, и введено обозначение $\nu = (s_1 - s_2)/(s_1 + s_2)$. Специфика ФМ проявляется только при весьма малых значениях $\nu \ll 1$, в противном случае ФМ ведет себя как ФМ и описывается уравнением Ландау–Лифшица с некоторой эффективной спиновой плотностью спина $s_{eff} = s_1 - s_2$. В рамках сигма-модели вектор $\mathbf{m}$ играет роль вспомогательной переменной и выражается через $\mathbf{l}$ и $\partial \mathbf{l} / \partial t$ простой формулой

$$\mathbf{m} = \nu \mathbf{l} + \frac{1}{\omega_{ex}} \left[\frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} \times \mathbf{l} \right]. \quad (3)$$

Таким образом, вместо двух уравнений для намагниченностей подрешеток можно использовать одно уравнение для $\mathbf{l}$. Энергию кирального магнетика выберем в простейшем виде, который допускает описание динамики ДС:

$$W = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{A}{2} (\nabla \cdot \mathbf{l})^2 + \frac{K}{2} (l_x^2 + l_y^2) - D [l_z (\nabla \cdot \mathbf{l}) - (\mathbf{l} \cdot \nabla) l_z] \right\}, \quad (4)$$

где первое слагаемое определяет энергию неоднородного обмена с константой A , второе — энергию одноосной анизотропии, легкая ось выбрана вдоль оси z , $K > 0$. Последнее слагаемое под интегралом определяет киральное ВДМ, характерное для тонкой пленки, поверхность которой перпендикулярна оси z .

Уравнение обобщенной сигма-модели (ref23040-Eq2) было получено в предположении $\nu \ll 1$. Для описания АФМ достаточно сделать простой предельный переход $s_1 \rightarrow s_2$, т. е. положить $s_1 = s_2$ или $\nu = 0$. При этом гироскопическое слагаемое в выражении (ref23040-Eq2), линейное по $\partial \mathbf{l} / \partial t$, отсутствует, и вторые производные вектора $\mathbf{l}$ входят в уравнения в комбинации

$$\frac{\hbar(s_1 + s_2)}{\omega_{ex}} \frac{\partial^2 \mathbf{l}}{\partial t^2} - A(\nabla^2 \mathbf{l}),$$

что можно переписать как $(\partial^2 \mathbf{l} / \partial t^2) - c^2(\nabla^2 \mathbf{l})$, где c — характерная скорость, которая совпадает с минимальной фазовой скоростью магнонов,

$$c = \sqrt{\frac{A\omega_{ex}}{\hbar(s_1 + s_2)}}. \quad (5)$$

Наличие такой формальной лоренц-инвариантности значительно упрощает анализ различных режимов нелинейной спиновой динамики в АФМ, включая эффекты квантового туннелирования [32], антиферромагнитную спинтронику [33] и сверхбыструю спиновую динамику АФМ под действием фемтосекундных лазерных импульсов [34, 35]. Однако для киральных магнетиков эта лоренц-инвариантность разрушена даже при $\nu = 0$ [36]. Одновременное разрушение и точной интегрируемости уравнений, и лоренц-инвариантности приводит к интересным особенностям динамики ДС, которые и являются предметом анализа настоящей работы.

3. СТРУКТУРА ДВИЖУЩЕЙСЯ СТЕНКИ

Для анализа солитонных решений удобно использовать угловые переменные для единичного вектора $\mathbf{l}$,

$$l_z = \cos \theta, \quad l_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad l_y = \sin \theta \sin \varphi. \quad (6)$$

Полярная ось z выбрана вдоль легкой оси магнетика. По обе стороны от доменной стенки $\theta = 0$ и $\theta = \pi$.

Движущиеся ДС описываются решениями типа простых волн, для которых $\theta = \theta(x - vt)$ и

$\varphi = \varphi(x - vt)$, v — скорость ДС. Уравнения для θ и φ принимают вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений относительно переменной $x - vt$. Для определенности будем считать что $\theta \rightarrow 0$ при $x - vt \rightarrow -\infty$ и $\theta \rightarrow \pi$ при $x - vt \rightarrow +\infty$. Несмотря на отсутствие точной лоренц-инвариантности, удобно выбрать в качестве независимой переменной величину

$$\xi = \frac{x - vt}{x_0 \sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

где $x_0 = \sqrt{A/K}$ определяет ширину неподвижной стенки. Уравнения для θ и φ удобно записать в безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \theta'' - [1 + (\varphi')^2] \sin \theta \cos \theta + \bar{\nu} \frac{v}{\sqrt{c^2 - v^2}} \varphi' \sin \theta - \\ - \frac{4D}{\pi D_c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \varphi' \sin^2 \theta \sin \varphi = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} (\varphi' \sin^2 \theta)' - \bar{\nu} \frac{v}{\sqrt{c^2 - v^2}} \theta' \sin \theta + \\ + \frac{4D}{\pi D_c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \theta' \sin^2 \theta \sin \varphi = 0, \end{aligned}$$

где штрихом обозначена производная по ξ , критическое значение $D_c = 2E_0/\pi$ определяет границу термодинамической устойчивости однородного состояния, величина $E_0 = \sqrt{AK}$ и введено нормированное значение параметра раскомпенсации ν , $\bar{\nu} = \nu \sqrt{\omega_{ex}/\omega_a}$, где $\omega_a = K/\hbar(s_1 + s_2)$ — характерная частота, отвечающая энергии анизотропии. Поскольку $\omega_{ex} \gg \omega_a$, величина $\bar{\nu} \gg \nu$; для различных нелинейных задач спиновой динамики значение $\bar{\nu} \sim 1$ отвечает тому случаю, когда проявляются эффекты, специфические для ФМ [22–25, 31, 37, 38]. Важно отметить, что хотя при $D > D_c$ выгодно спиральное состояние, в этой области однородное состояние является метастабильным, и на его фоне возможно решение типа ДС, но энергия этой ДС отрицательна [39].

Эта система уравнений формально эквивалентна механической задаче с двумя степенями свободы (переменная ξ играет роль времени) о движении материальной точки по поверхности сферы при наличии потенциала, равного $-(K/2) \sin^2 \theta$, и двух различных гироскопических слагаемых. Одно из них является стандартным для ФМ или ФМ, оно пропорционально скорости ДС v и параметру раскомпенсации $s_1 - s_2$, а второе обусловлено ВДМ. Для этой системы можно построить один первый интеграл

$$Q = (\theta')^2 + (\varphi')^2 \sin^2 \theta - \sin^2 \theta, \quad (8)$$

принимая на решении типа ДС значение $Q = 0$.

Второй интеграл движения построить не удастся, и в общем случае система (ref23040-eq7) не является точно интегрируемой. Для одноосного магнетика с энергией, инвариантной относительно произвольных поворотов вокруг оси z , сохраняется величина μ_z — компонента вектора «кинетического момента» $\mu = \mathbf{l} \times \mathbf{l}'$, что позволяет построить двухпараметрические солитоны со спиновой прецессией [11, 29, 40], но ВДМ нарушает эту симметрию.

Наличие ВДМ разрушает интегрируемость нашей задачи и не позволяет построить точные аналитические решения, но приводит к интересным особенностям решений типа ДС. Точно интегрируемые системы с двумя степенями свободы обладают некоторыми характерными чертами сепаратрисных решений, описывающих разные типы солитонов. В принципе, проявление неинтегрируемости в случае ФМ с любым значением $\overline{\nu}$ такие же, как для ФМ, их анализ можно найти в работе [39]. Для случая ФМ оказываются важными две особенности, которые мы обсудим здесь.

Во-первых, для интегрируемой системы тип особой точки в значительной степени определяет свойства семейства солитонов. Гетероклинические траектории (описывающие ДС) могут существовать только для особых точек седлового типа [41–43]. Характер особой точки можно легко найти путем аналитического продолжения спектра спиновых волн на комплексные волновые векторы и частоты [44, 45]. Положения равновесия для уравнений типа (ref23040-eq7), (ref23040-eq8), описывающих простые волны намагниченности, соответствуют особой точке типа седло, если скорость волны меньше некоторой характерной скорости $v_{(-)}$, $|v| \leq v_{(-)}$. Локализованные решения возможны при $|v| \leq v_{(+)}$, где $v_{(+)}$ совпадает с минимальной фазовой скоростью магнонов [45]. Для известных нам моделей магнетиков значение $v_{(-)} < v_{(+)}$ [45]. В интервале $v_{(-)} < v < v_{(+)}$ положения равновесия являются особыми точками типа седло – фокус. В этом случае наличие гетероклинических траекторий является неким вырождением системы, т. е. такие траектории могут существовать только при некоторых изолированных значениях параметров системы. Это позволяет легко найти предельную скорость ДС для интегрируемых систем, но не может быть использовано при нарушении интегрируемости [46, 47]. Это особенно важно для нашего случая, поскольку для киральных магнетиков с чисто одноосной анизотропией значение $v_{(-)} = 0$ [39], для ФМ $v_{(+)} = c/\sqrt{1 + \overline{\nu}^2/4}$.

Во-вторых, для интегрируемой системы имеется только одна пара ДС, которые могут двигаться со скоростью $v \leq v_c$, где v_c — критическая скорость. Эти две ДС соответствуют двум ветвям зависимости энергии ДС от ее скорости, $E = E(v)$; эти ветви существуют при $v \leq v_c$ и сливаются при критическом значении $v = v_c$. Других решений типа ДС в интегрируемом случае нет [41–43]. Если же интегрируемость разрушена, то возникают новые типы ДС.

Фактически, эти нетривиальные свойства определены различным характером поведения траекторий в интегрируемом и неинтегрируемом случаях. Гамильтоновость системы приводит к слоению фазового пространства на уровни гамильтониана, а интегрируемость (наличие дополнительного интеграла) приводит к дополнительному слоению на уровни второго интеграла. Хотя большинство таких уровней представляет собой инвариантные торы, интересующие нас уровни содержат особые точки и являются более сложными двумерными поверхностями. При переходе к неинтегрируемой системе второе слоение пропадает, и гомо- и гетероклинические траектории лежат в трехмерном уровне гамильтониана и ведут себя очень сложно. В частности, может возникать счетное множество гетероклинических траекторий. Эти траектории описывают ДС со сложной внутренней структурой. В частности, для них возможно немонотонное поведение компонент вектора $\mathbf{l}$, продольной l_z или поперечных $l_{x,y}$, вдали от стенки, что согласуется с возможностью движения со скоростью $v > v_{(-)}$ (естественно, при $v < v_c$). Такое поведение наблюдалось для ДС в различных неинтегрируемых моделях [46–49]. В принципе, оно присутствует и для кирального ФМ, но для них ДС с немонотонным поведением ранее не рассматривались, во всяком случае в известных нам работах [26–28, 39] (см. также ссылки в них). Вероятно, это связано с тем, что немонотонные ДС в ФМ имеют более высокую энергию.

При всех разумных значениях константы ВДМ $D \leq D_c$ структура ДС хорошо описывается простым приближенным решением вида

$$\varphi = \varphi_0(v) = \text{const}, \quad \cos \theta = \text{th}[(x - vt)/x_0],$$

при этом значение угла φ_0 определяется скоростью ДС, $\sin \varphi_0(v) = v/v_{c,FM}$, где $v_{c,FM}$ — предельная скорость ДС в ФМ [39], $v_{c,FM} = c(D/D_c)\sqrt{\omega_a/\omega_{ex}}$. Энергия ДС в ФМ определяется простой формулой $E_{FM} = 2E_0(1 - D \cos \varphi_0/D_c)$, т. е. зависимость $E_{FM}(v)$ описывается замкнутой выпуклой кривой, она имеет две ветви с большей и меньшей энергиями, которые сливаются в точке $v = v_{c,FM}$. Такая

закономерность имеет место для ДС в рамках точно интегрируемой модели Уокера [50].

4. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ДС В ФИМ

Приведенные выше простые формулы получены в рамках приближения $\varphi = \varphi_0(v) = \text{const}$, но это приближение с очень высокой точностью описывает характеристики ДС в киральном ФМ, в частности, зависимость энергии ДС от ее скорости. Рассмотрим, как эти соотношения трансформируются при переходе к случаю ФИМ.

Уравнения Ландау – Лифшица получаются из уравнений обобщенной сигма-модели в пределе $\nu \rightarrow 1$ (при этом $\bar{\nu} = \sqrt{\omega_{ex}/\omega_a} \gg 1$) и $c \rightarrow \infty$. Если предположить, что $\varphi = \varphi_0(v) = \text{const}$, то для энергии ДС в ФИМ легко получается сходная связь $\sin \varphi_0(v) = v/v_{c,0}$, где $v/v_{c,0}$ — предельная скорость ДС, найденная в предположении $\varphi = \text{const}$, $v_{c,0} = v_{c,FM}/\nu = c(D/D_c)/\bar{\nu}$. Формула для энергии ДС в этом же приближении имеет вид

$$E(v, \varphi_0) = \frac{2E_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 2E_0 \frac{D}{D_c} \cos \varphi_0. \quad (9)$$

Первое слагаемое в формуле для энергии такое же, как в лоренц-инвариантной теории, а второе слагаемое такое же, как в ФМ. Энергии ДС при нулевой скорости $v = 0$ остаются теми же, что для ФМ, они равны $E_{(\pm)} = 2E_0(1 \pm D/D_c)$, но с ростом скорости энергии ДС в ФИМ $E(v)$ выше, чем в ФМ, за счет «релятивистского» множителя $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. При уменьшении ν предельная скорость растет, и этот «подъем» ветвей становится все более существенным. Ясно, что при определенном критическом значении ν_{nt} выпуклость кривой, описывающей зависимость $E(v)$ нарушается. При $\nu < \nu_{nt}$ максимальное значение энергии $E_{max} = E(v_{max})$ отвечает некоторой конечной скорости $v_{max} < v_c$, $E_{max} > E_{(+)}$, и на верхней ветви имеет место локальный минимум энергии. Таким образом, замкнутая кривая перестает быть выпуклой. Важно заметить, что в этом случае поведение импульса ДС и характер закона дисперсии $E = E(P)$ меняется принципиально, и появляется точка окончания спектра ДС [22,23]. Поскольку данные закономерности такие же, как для рассмотренной в работах [22,23] ФИМ-версии точно интегрируемой модели Уокера, мы их не обсуждаем.

Условие $\varphi = \text{const}$ характерно для ДС в интегрируемой модели Уокера [50], см. также [11], и можно ожидать, что это приближение справедливо,

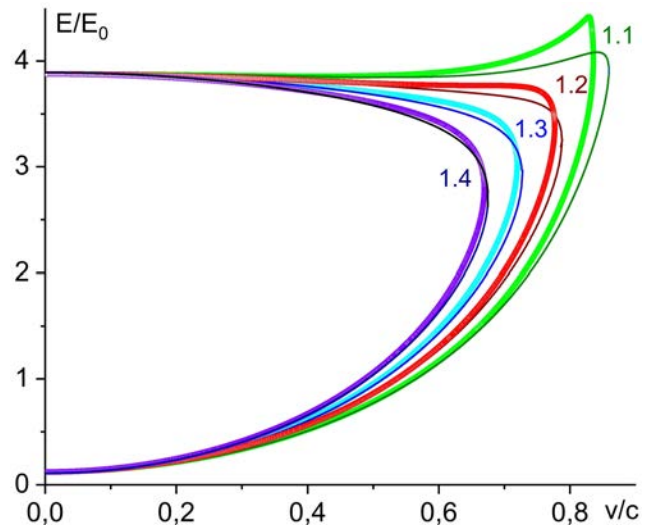


Рис. 1. Зависимость $E(v)$ (здесь и далее энергия представлена в единицах E_0 , а скорость в единицах c) для ФИМ с $D/D_c = 0.945$ при значениях параметра раскомпенсации $\bar{\nu} = 1.1, 1.2, 1.3, 1.4$, которые обозначены цифрами около кривых. Тонкие линии — аналитические результаты, полученные в приближении $\varphi = \text{const}$

когда роль эффектов разрушения интегрируемости минимальна. Фактически, анализ случая ФМ показал именно такое поведение: приближение $\varphi = \text{const}$ описывает точные данные, полученные численно, при всех допустимых значениях $D \leq D_c$ и при скоростях $v \leq v_{c,FM}$. Однако для ФИМ при малых значениях $\bar{\nu}$ это приближение явно не адекватно; достаточно заметить, что при $D > D_c/\bar{\nu}$ (при $\bar{\nu} < 1$ это не противоречит условию $D < D_c$) значение $v_{c,0}$ становится больше c , что заведомо неверно. Дело в том, что эффективное значение константы ВДМ в уравнениях (ref23040-eq7) усилено за счет «релятивистского» множителя $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. При уменьшении $\bar{\nu}$ предельная скорость ДС растет, следовательно, для ФИМ с малым $\bar{\nu}$ растет эффективное значение константы ВДМ и возрастают эффекты неинтегрируемости. В частности, увеличиваются отклонения зависимости $E(v)$, найденной в приближении $\varphi = \text{const}$, от точной (рис. 1).

Надо заметить, что эти отклонения достаточно малы при достаточно малых $\bar{\nu} \sim 1.3\text{--}1.4$, но они очень резко увеличиваются при приближении к некоторому критическому значению ($\bar{\nu} = 1.1$ на рис. 1). Такое же поведение имеет место для всех значений параметра $D \leq D_c$, но критическое значение $\bar{\nu}$ уменьшается с уменьшением D . Именно в этой области значение предельной скорости ДС велико, и анализ этой ситуации особо важен с точки

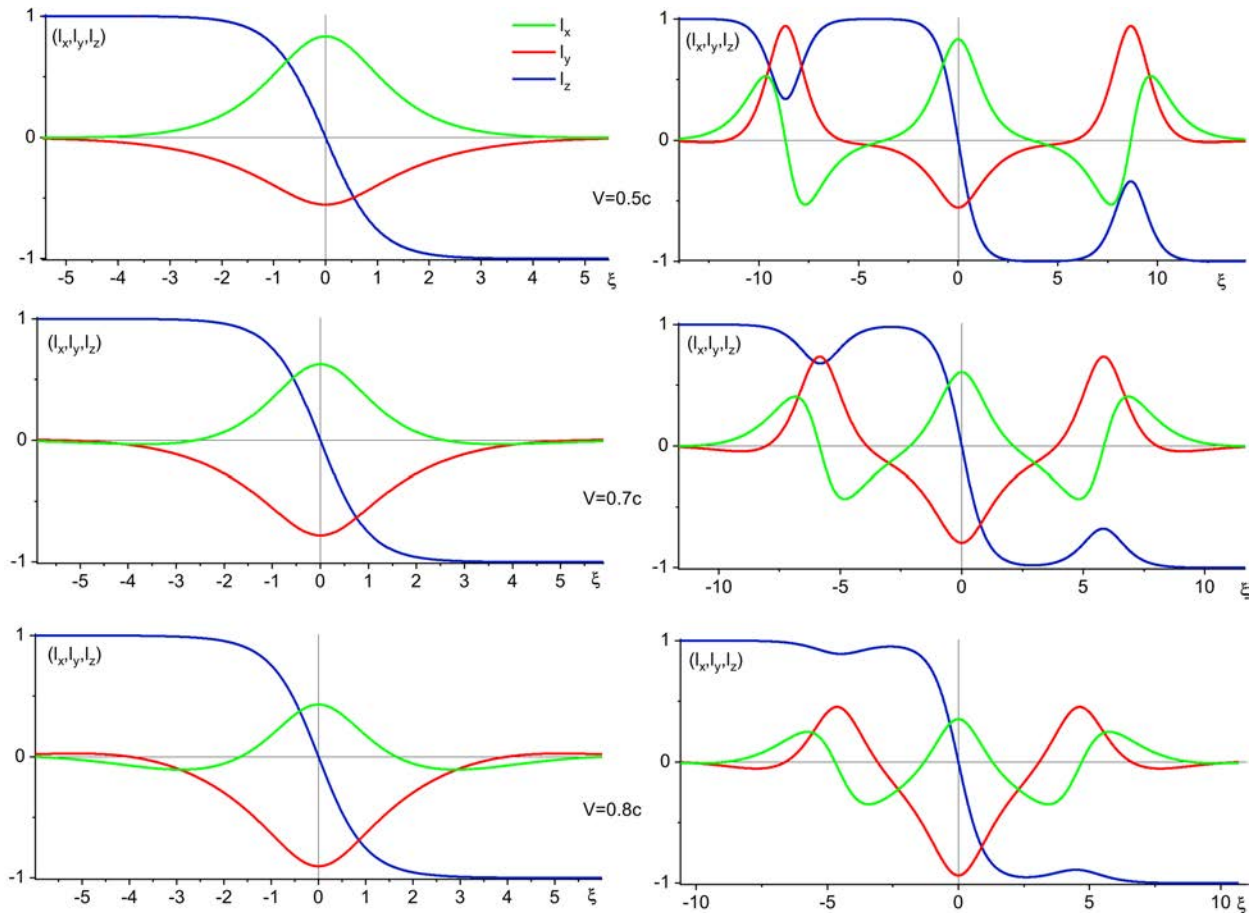


Рис. 2. Распределения компонент вектора $\mathbf{l}$ в ДС, найденное численно при значениях параметров $\bar{v} = 1.1$ и $D/D_c = 0.95$, что несколько выше значения D_{bif} , которое при этом $\bar{v}$ равно $D_{bif}/D_c = 0.948$. Представлены данные для ДС нижней (слева) и верхней (справа) ветвей. Значения скоростей равны $v = 0.5c$, $v = 0.7c$ и $v = 0.8c$ соответственно для верхнего, среднего и нижнего рядов

зрения применений ДС. Точное аналитическое решение для движущейся ДС построить не удастся, и был проведен интенсивный численный анализ ДС во всей области их существования для различных значений параметров D/D_c и $\bar{v}$.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА ДОМЕННЫХ СТЕНОК

Детальное описание используемого численного метода можно найти в недавней работе [39]. Важным моментом является использование надежного и простого метода продолжения по параметру (метод продолжения Келлера [51]). В рамках этого метода, если известна одна фазовая траектория, может быть построена другая траектория, близкая к исходной, с заранее заданным значением «расстояния» между ними. Для вновь построенной траектории значение некоторого заданного параметра уравнения отличается от такового для исходной траектории. В прин-

ципе, все параметры, скорость стенки v , D/D_c или $\bar{v}$ могут быть использованы в качестве этого варьируемого параметра.

В качестве отправной точки можно использовать неподвижное решение с известной структурой, а в качестве варьируемого параметра — скорость стенки. При этом можно построить все многообразие ДС с различными скоростями при заданных значениях констант D/D_c или $\bar{v}$. Применение этого подхода привело к достаточно интересному результату. Получилось, что если в качестве начальной точки выбиралась неподвижная ДС с минимальной энергией, то при определенных значениях $D < D_{bif}$, где $D_{bif} = D_{bif}(\bar{v})$ — некоторое характерное значение, программа находит ДС с монотонным поведением $l_z(\xi)$ (далее для краткости будем называть их монотонными ДС), энергии которых описываются замкнутыми кривыми такого типа, как приведены выше на рис. 1. Если же $D > D_{bif}$, то при выходе из той же начальной точки при изменении ско-

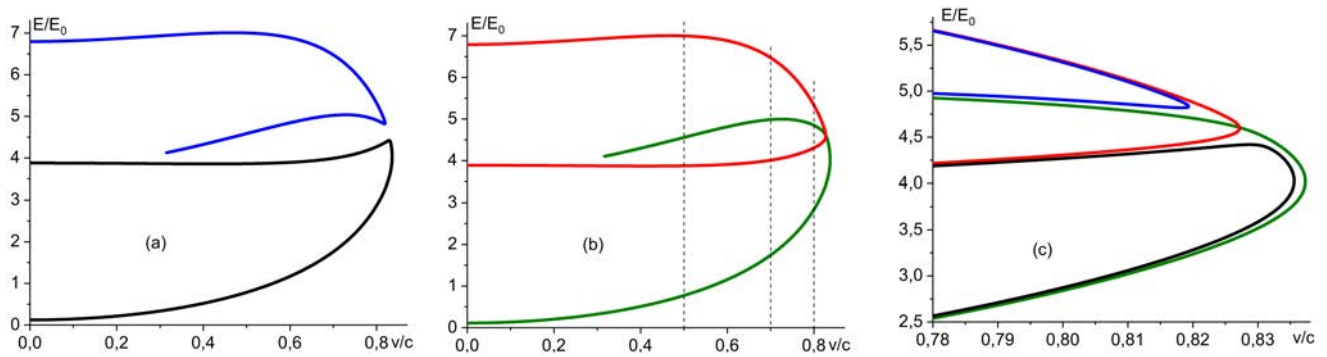


Рис. 3. Зависимости $E(v)$ для ФМ с $\bar{\nu} = 1.1$ при различных значениях константы ВДМ вблизи бифуркационного значения $D_{bif} = 0.94814D_c$: а — $D = 0.945D_c < D_{bif}$ (нижняя и верхняя ветви соответствуют монотонным и немонотонным ДС); б — при $D = 0.95D_c > D_{bif}$ происходит перезамыкание кривых; в — обе кривые $E(v)$ при указанных двух значениях параметра D вблизи предельной скорости

рости непрерывно возникают ДС с немонотонным поведением зависимости $l_z(\xi)$ (немонотонные ДС). Структуры всех этих стенок представлены на рис. 2. При этом зависимость $E(v)$ описывается замкнутой кривой, но в рамках одной такой кривой нижняя и верхняя ветви соответствуют монотонным и немонотонным ДС.

Отметим, что при немного меньшем значении $D/D_c = 0.945$ поведение кривой $E(v)$ и характер стенок абсолютно иные. Вся нижняя кривая отвечает монотонным стенкам и, как видно из рис. 1, качественно описывается «ферромагнитным» приближением $\varphi = \text{const}$. Таким образом, получается, что при незначительном изменении скорости характер кривых изменяется качественно, и в системе имеет место бифуркация решений. Характер этой бифуркации становится понятным, если включить в рассмотрение и немонотонные ДС, энергия которых при $D < D_{bif}$ определяется отдельной замкнутой кривой (рис. 3а). Вдали от бифуркации эти кривые находятся достаточно далеко друг от друга, энергия немонотонных стенок существенно выше, и их можно не рассматривать. Однако при увеличении D в области $D < D_{bif}$ нижняя кривая поднимается, а верхняя, отвечающая немонотонным ДС, опускается; при этом кривые сближаются друг с другом, образуя характерные выступы, направленные вверх и вниз, как на рис. 3а.

При дальнейшем движении к точке бифуркации происходит следующее: кривые $E(v)$ движутся навстречу друг другу, при бифуркационном значении они касаются друг друга, а далее кривые расщепляются, и их ветви перезамыкаются так, что верхняя и нижняя ветви для обеих функций меняются местами, см. рис. 3б и более детально рис. 3в. В результате появляются две новые непрерывные кривые $E(v)$,

для каждой из которых присутствуют как монотонные, так и немонотонные ДС.

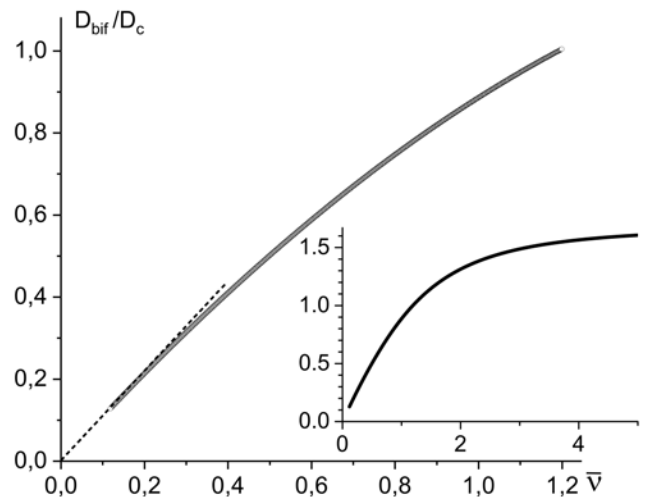


Рис. 4. Связь между значениями D_{bif}/D_c и $\bar{\nu}$, найденная численно. На вставке приведена эта же зависимость для более широкой области параметров

Анализ показал, что наличие такого бифуркационного поведения является общим свойством кирального ФМ, и оно присутствует при всех допустимых значениях приведенной константы ВДМ D/D_c . Однако для наблюдения эффекта бифуркации при малых значениях D/D_c ФМ должен быть достаточно близко к точке компенсации спина (рис. 4). Фактически, при всех $D \leq D_c$ эффекты бифуркации проявляются только в узкой окрестности точки компенсации, $\bar{\nu} < 1.2$. Однако при переходе в область метастабильности однородного состояния $D > D_c$ характерное значение $\bar{\nu}$ быстро растет.

Численный расчет проведен для значений $D_{bif}/D_c > 0.118$; при меньших D_{bif}/D_c значение $\bar{\nu}$ мало, предельная скорость v очень близка к c ,

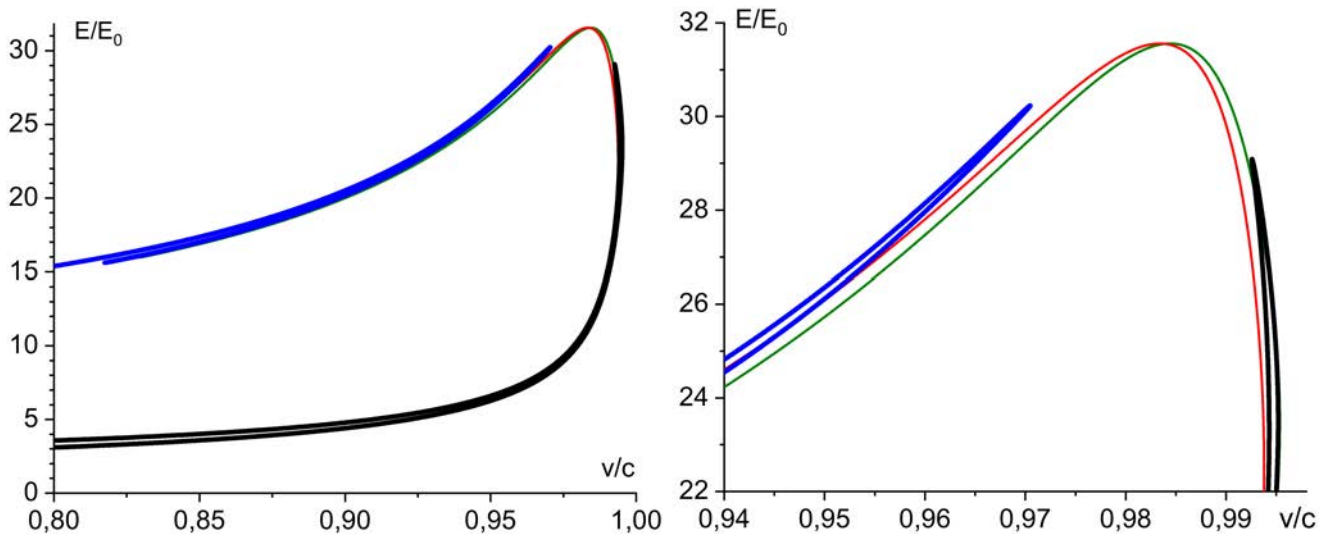


Рис. 5. Зависимости $E(v)$ для ФМ с $\bar{\nu} = 0.17$ при различных значениях константы ВДМ вблизи бифуркационного значения $D_{bif} = 0.18302D_c$; слева — зависимости при $D = 0.18D_c < D_{bif}$ (жирные линии) и при $D = 0.19D_c > D_{bif}$ (тонкие линии); справа — детали поведения кривых вблизи точки пересечения

гироскопические слагаемые в уравнениях (ref23040-eq7) за счет «релятивистского» множителя $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ сильно возрастают и программа работает нестабильно (штриховая линия на рис. 4 — линейная интерполяция в эту область). На вставке к рис. 4 также приведены данные для более широкой области параметров, до значений $\bar{\nu} = 5$, включающей область метастабильности однородного состояния $D_{bif} > D_c$.

При малых значениях D/D_c характер бифуркации качественно такой же, как и для рассмотренного выше случая $D < D_c$, но значения скорости в точке бифуркации близки к c , а энергии стенок в районе бифуркации высокие (рис. 5).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ структуры и свойств ДС в киральных ФМ продемонстрировал более сложное поведение, чем для рассмотренных ранее многими авторами киральных ФМ [26–28, 39] или ФМ без киральных вкладов в энергию [22, 23]. Для ДС в киральных ФМ может иметь место «перемешивание» стандартных ДС и ДС с немонотонным поведением l_z -проекции спиновой плотности в пределах одной кривой зависимости $E = E(v)$. Появление этого эффекта имеет характер бифуркации и появляется при переходе через характерные значения $D = D_{bif}(\nu)$ или $\bar{\nu} = \bar{\nu}_{bif}(D)$. При значениях параметров на плоскости $(\bar{\nu}, D)$ в области ниже бифуркационной кривой (см. рис. 4) зависимость $E = E(v)$ представлена двумя замкнутыми кривыми, нижняя кривая соответствует ДС с монотонным поведением $l_z(\xi)$, верх-

няя кривая — ДС с немонотонным поведением $l_z(\xi)$. Выше кривой, т. е. при $D > D_c$ или, эквивалентно, при $\bar{\nu} < \bar{\nu}_{bif}(D)$, каждой из этих двух кривых соответствуют ДС и с монотонным, и с немонотонным поведением.

Благодарности. Автор благодарит Б. А. Иванова и Л. М. Лермана за сотрудничество и плодотворные обсуждения.

Финансирование. Работа поддержана Российским научным фондом (грант 22-11-00027).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Atkinson, D. A. Allwood, G. Xiong et al., *Nature Mater.* **2**, 85 (2003).
2. A. Yamaguchi, T. Ono, S. Nasu et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 077205 (2004).
3. M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya et al., *Science*, **320**, 209 (2008).
4. A. Hoffmann and S. D. Bader, *Phys. Rev. Appl.* **4**, 047001 (2015).
5. G. Tatara and H. Kohno, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 086601 (2004).
6. A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat, and Y. Suzuki, *Eur. Phys. Lett.* **69**, 990 (2005).
7. O. A. Tretiakov, D. Clarke, G.-W. Chern et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 127204 (2008).

8. A. V. Khvalkovskiy, V. Cros, D. Apalkov et al., Phys. Rev. B **87**, 020402 (2013).
9. S. S. P. Parkin and S.-H. Yang, Nature Nanotechnol. **10**, 195 (2015).
10. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, Physica D **3**, 363 (1981).
11. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, Phys. Rep. **194**, 117 (1990).
12. А. Б. Борисов, В. В. Киселев, *Нелинейные волны, солитоны и локализованные структуры в магнетиках*, в двух томах, УроРАН, Екатеринбург (2009).
13. М. В. Четкин, Де Ла Кампа, Письма в ЖЭТФ **27**, 168 (1978).
14. А. Л. Звездин, Письма в ЖЭТФ **29**, 605 (1979).
15. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, ЖЭТФ **75**, 2183 (1978).
16. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, ЖЭТФ **78**, 1509 (1980).
17. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, М. В. Четкин, УФН **146**, 417 (1985).
18. A. P. Malozemoff and J. C. Slonczewski, *Magnetic Domain Walls in Bubble Materials*, Acad. Press, New York (1981).
19. K.-J. Kim, S. K. Kim, Y. Hirata et al., Nature Mater. **16**, 1187 (2017).
20. M. V. Logunov, S. S. Safonov, A. S. Fedorov et al., Phys. Rev. Appl. **15**, 064024 (2021).
21. L. Caretta, M. Mann, F. Buttner et al., Nature Nanotechnol. **13**, 1154 (2018).
22. Е. Г. Галкина, К. Э. Заспел, Б. А. Иванов и др., Письма в ЖЭТФ **110**, 474 (2019).
23. B. A. Ivanov, E. G. Galkina, V. E. Kireev et al., Low Temp. Phys. **46**, 841 (2020).
24. A. K. Zvezdin, Z. V. Gareeva, K. A. Zvezdin, J. Magn. Magn. Mater. **509**, 166876 (2020).
25. B. A. Ivanov, Low Temp. Phys. **45**, 935 (2019).
26. A. Thiaville, S. Rohart, E. Jue et al., Europhys. Lett. **100**, 57002 (2012).
27. V. V. Slastikov, C. B. Muratov, J. M. Robbins et al., Phys. Rev. B **99**, 100403(R) (2019).
28. V. P. Kravchuk, J. Magn. Magn. Mater. **367**, 9 (2014).
29. E. G. Galkina and B. A. Ivanov, Low Temp. Phys. **44**, 618 (2018).
30. A. B. Borisov, V. V. Kisieliev, and G. G. Talutz, Sol. St. Comm. **44**, 411 (1982).
31. Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, ЖЭТФ **84**, 370 (1983).
32. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **61**, 495 (1995).
33. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi et al., Rev. Mod. Phys. **90**, 015005 (2018).
34. A. Kirilyuk, A. V. Kimel, and Th. Rasing, Rev. Mod. Phys. **82**, 2731 (2010).
35. B. A. Ivanov, Low Temp. Phys. **40**, 91 (2014).
36. S. Komineas and N. Papanicolaou, SciPost Phys. **8**, 086 (2020).
37. C. E. Zaspel, E. G. Galkina, and B. A. Ivanov, Phys. Rev. Appl. **12**, 044019 (2019).
38. I. Lisenkov, R. Khymyn, J. Akerman et al., Phys. Rev. B **100**, 100409(R) (2019).
39. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин и др., ЖЭТФ **159**, 671 (2021).
40. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, Письма в ЖЭТФ **25**, 516 (1977).
41. L. M. Lerman, Selecta Math. Sov. **12**, 333 (1993).
42. Л. М. Лерман, Письма в ЖЭТФ **51**, 336 (1990).
43. Л. М. Лерман, Я. Л. Уманский, ПММ **47**, 395 (1983).
44. E. Schlomann, Appl. Phys. Lett. **19**, 274 (1971).
45. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, Письма в ЖЭТФ **27**, 226 (1978).
46. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **75**, 2210 (1978).
47. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **77**, 409 (1979).
48. Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **112**, 953 (1997).
49. Н. Е. Кулагин, А. Ф. Попков, Письма в ЖЭТФ **43**, 197 (1986).
50. L. R. Walker, in *Magnetism*, ed. by G. T. Rado and H. Suhl, Pergamon, New York (1963), Vol. 3, p. 451.
51. T. F. C. Chan and H. B. Keller, SIAM J. Sci. Stat. Comput. **3**, 173 (1982).

СИНХРОНИЗАЦИЯ АВТОКОЛЕБАНИЙ МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В ОБМЕННО-СВЯЗАННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ДИСКАХ

Д. А. Татарский ^{a,b,*}, В. Л. Миронов ^a, А. А. Фраерман ^a

^a Институт физики микроструктур Российской академии наук
607680, Нижний Новгород, Россия

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

Поступила в редакцию 24 сентября 2022 г.,
после переработки 24 сентября 2022 г.
Принята к публикации 13 октября 2022 г.

Методом численного моделирования исследованы низкочастотные (гиротропные) автоколебания магнитных вихрей во взаимодействующих ферромагнитных дисках, вызванные протеканием спин-поляризованного тока. Рассмотрены различные моды колебаний намагниченности в зависимости от конфигурации магнитного состояния системы. Исследовано влияние неоднородности тока накачки на разность фаз гирации вихрей в соседних дисках. Показано, что перекрытие дисков приводит к увеличению взаимодействия между вихрями и, как следствие, к уменьшению расфазировки колебаний коро́в вихрей. Обсуждаются перспективы применения перекрывающихся дисков для обеспечения фазовой синхронизации массивов вихревых спин-трансферных генераторов.

DOI: 10.31857/S0044451023030082

EDN: QE0JNZ

1. ВВЕДЕНИЕ

Спин-трансферные наноосцилляторы (СТНО) на основе наноразмерных магнитных спиновых вентилях активно исследуются в последние десятилетия в связи с перспективой создания компактных генераторов гигагерцевого диапазона частот [1, 2]. В основе работы данных приборов лежит явление возникновения автоколебаний намагниченности ферромагнетика под действием поляризованного по спине электрического тока [3, 4]. Из-за эффекта магнитосопротивления колебания намагниченности приводят к колебаниям напряжения на спиновом вентиле. В первых СТНО индуцированные током возбуждения представляли собой квазиоднородную прецессию магнитного момента в металлических многослойных структурах с гигантским магнитосопротивлением [5, 6]. Однако такие СТНО генерировали малую микроволновую мощность.

В настоящее время основные исследования в данной области направлены как на увеличение генерируемой мощности отдельного СТНО, так и на

решение проблемы синхронизации большого числа СТНО с целью увеличения суммарной генерируемой мощности. Существенный прогресс был достигнут с переходом к СТНО на основе магнитных туннельных контактов (МТК) с туннельным барьером MgO [7–9]. Данные СТНО обеспечивают гораздо большую мощность из-за высоких значений туннельного магнитосопротивления. В работе [10] авторы предложили СТНО на основе низкочастотных колебаний магнитного вихря в металлических многослойных нанодисках. В этих структурах модуляция электрического тока через туннельный контакт осуществляется за счет вращающегося магнитного момента, индуцированного в магнитном вихре при круговом (гиротропном) движении кора вихря вокруг положения равновесия. Частота гиротропных колебаний вихря лежит в мегагерцевом диапазоне частот [11]. Использование вихревого наноосциллятора на основе МТК с барьером MgO позволяет реализовать достаточно большие микроволновые мощности (на уровне $10^{-7} - 10^{-5}$ Вт) [11–13].

Отметим, что существенным фактором, влияющим на работу наноосцилляторов на основе МТК, является разброс их парциальных частот, обусловленный различием токов накачки. Это различие возникает как результат различия туннельных со-

* E-mail: tatarsky@ipmras.ru

противлений контактов. Для синхронизации СТНО используются магнитостатическое [14–16] и обменное [17–20] взаимодействия между осцилляторами, обмен спиновыми волнами [21], а также внешние электрические цепи и волноводы [22–27]. Хорошо известно [28, 29], что частотная синхронизация двух осцилляторов возможна в том случае, если их взаимодействие превышает некоторое критическое значение, зависящее от разности парциальных частот. При этом разность фаз синхронизованных по частоте колебаний тем больше, чем ближе взаимодействие к критическому значению. Ситуация усложняется при попытке сфазировать большое количество автоосцилляторов. Как показано в работе [30], дисперсия разности фаз в системе из N осцилляторов возрастает примерно как N^{4-D} , где D — размерность системы. Таким образом, в одномерной цепочке наноосцилляторов ($D = 1$) дисперсия нарастает по кубическому закону, что может приводить к уменьшению средней генерируемой мощности с увеличением числа генераторов [31].

Увеличения энергии взаимодействия вихревых спин-трансферных наноосцилляторов (ВСТНО) можно добиться путем уменьшения расстояния между ферромагнитными дисками. Если диски не перекрываются, то взаимодействие между вихрями имеет исключительно магнитостатическую природу [29]. При перекрытии дисков между вихрями включается обменное взаимодействие и их взаимовлияние значительно возрастает. В работе [32] рассмотрена задача о динамике вихрей в эллиптической частице, находящейся в двухвихревом состоянии. В работе [33] исследована динамика вихрей в системе перекрывающихся магнитных дисков. В нашей работе исследуются возможности фазовой синхронизации движения магнитных вихрей в ферромагнитных дисках, которые ранее не рассматривались.

2. МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ДИСКАХ

Моделирование равновесных распределений и колебаний намагниченности проводилось посредством численного интегрирования уравнения Ландау–Лифшица–Гилберта–Слончевского для магнитного момента с учетом переноса спина

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\frac{|\gamma|}{1+\alpha^2} [\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}] + \mathbf{T}_D + \mathbf{T}_S, \quad (1)$$

где $\mathbf{m}$ — единичный вектор в направлении намагниченности, γ — гиромагнитное отношение, α — без-

размерный параметр, характеризующий процесс затухания. Эффективное магнитное поле $\mathbf{H}_{eff}$ выражается следующим образом:

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_{ms} + \mathbf{H}_{cur}, \quad (2)$$

где $\mathbf{H}_{ex}$ — обменное поле, $\mathbf{H}_{ms}$ — дипольное магнитостатическое поле, $\mathbf{H}_{cur}$ — поле спин-поляризованного тока. Слагаемое, описывающее затухание прецессии, имеет вид

$$\mathbf{T}_D = -|\gamma| \frac{\alpha}{1+\alpha^2} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}]]. \quad (3)$$

Член, описывающий эффект переноса спина (spintorque), записывается в форме [3, 34]

$$\mathbf{T}_S = \beta \frac{\epsilon}{1+\alpha^2} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m}_P \times \mathbf{m}]] + \beta \frac{\alpha\epsilon}{1+\alpha^2} [\mathbf{m} \times \mathbf{m}_P], \quad (4)$$

где $\beta = j_z \hbar / eh M_{sat}$, j_z — плотность тока вдоль оси, перпендикулярной поверхности дисков, $\hbar$ — постоянная Планка, M_{sat} — магнитный момент насыщения, e — заряд электрона, h — толщина слоя инжектора. Параметр ϵ определяется по формуле

$$\epsilon = \frac{P\Lambda^2}{(\Lambda^2 + 1) + (\Lambda^2 - 1)(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_P)}, \quad (5)$$

где P — степень поляризации носителей заряда, и параметр Λ связан с кондактансом туннельного барьера [34]. Для решения уравнения (1) использовался симулятор MuMax3 [35]. В качестве базового элемента для моделирования был выбран круглый пермаллоевый диск радиусом $r = 250$ нм и толщиной $t = 20$ нм. В расчетах использовались следующие материальные параметры: магнитный момент насыщения $M_{sat} = 800$ кА/м, константа обменного взаимодействия $J_{ex} = 1.3 \cdot 10^{-11}$ Дж/м, параметр затухания $\alpha = 0.01$, константа анизотропии $K = 0$, $P = 0.2$ и $\Lambda = 1$. При моделировании использовалась сетка $256 \times 128 \times 1$ (для перекрывающихся дисков) или $384 \times 128 \times 1$ (для дисков без перекрытия) с размерами элементарной ячейки $4 \times 4 \times 20$ нм³, размер которой меньше обменной длины $l_{ex} \approx 5.7$ нм [36]. Высота ячейки равнялась толщине диска [37].

В ферромагнитном диске данных размеров реализуется вихревое распределение намагниченности (рис. 1а, б). В центральной части магнитного вихря (кор вихря) намагниченность направлена перпендикулярно плоскости диска (либо в положительном, либо в отрицательном направлении по отношению к внешней нормали), а в периферической части (оболочка вихря) намагниченность лежит в плоскости диска и имеет разную завихренность (либо по часовой стрелке, либо против часовой стрелки).

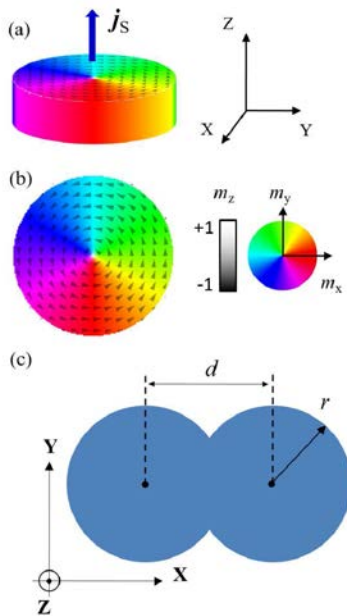


Рис. 1. *a*) Схематическое изображение ферромагнитного диска с вихревым распределением намагниченности, j_s — спин-поляризованный ток. *b*) Вид сверху на вихревое распределение в диске. *c*) Схематическое изображение двух перекрывающихся дисков

В системе, состоящей из двух дисков, расстояние между дисками удобно характеризовать параметром перекрытия

$$\nu = \frac{2r - d}{2r} 100\%, \quad (6)$$

где d — расстояние между центрами дисков (рис. 1*c*). При большом расстоянии ($\nu < 0$) между магнитными вихрями существует только магнитостатическое взаимодействие. Если диски перекрываются ($\nu > 0$), существует вклад, связанный с прямым обменным взаимодействием.

В системе перекрывающихся дисков реализуются различные вихревые конфигурации в зависимости от степени перекрытия ν (рис. 2). При малом пе-

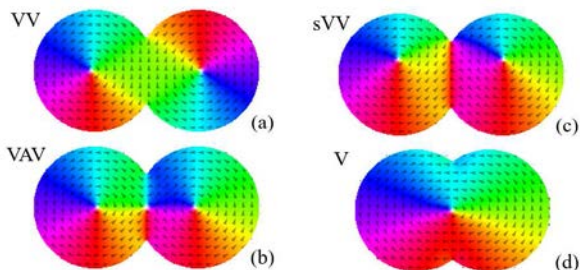


Рис. 2. Распределение намагниченности в перекрывающихся дисках: *a* — двухвихревое состояние с противоположной завихренностью каждого из вихрей, VV; *b* — двухвихревое состояние с одинаковой завихренностью вихрей, разделенных антивихрем, VAV; *c* — сдвинутое двухвихревое состояние, sVV; *d* — одновихревое состояние, V

рекрытия могут реализовываться следующие двухвихревые состояния: двухвихревое состояние с противоположной завихренностью каждого из вихрей VV (рис. 2*a*), двухвихревое состояние с одинаковой завихренностью вихрей, разделенных антивихрем, VAV (рис. 2*b*), сдвинутое из центров дисков двухвихревое состояние, sVV (рис. 2*c*). При больших перекрытиях система переходит в одновихревое состояние, обозначенное как состояние V (рис. 2*d*).

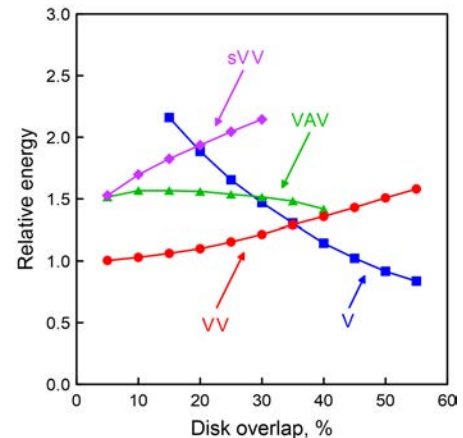


Рис. 3. Зависимости полной магнитной энергии для разных состояний от перекрытия дисков. Все энергии нормированы на двойную энергию вихря в одиночном диске

На рис. 3 представлены зависимости энергии системы в различных магнитных конфигурациях от степени перекрытия дисков. Энергия нормирована на удвоенную энергию изолированного магнитного вихря. Как видно на рисунке, при малых перекрытиях в системе реализуются двухвихревые состояния, а при перекрытии, превышающем 30%–35%, одновихревое состояние становится основным состоянием системы.

3. АВТОКОЛЕБАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ВИХРЕЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА

3.1. Гиротропные автоколебания одиночного вихря

Прежде всего, мы исследовали автоколебания вихревого распределения намагниченности в отдельном диске под действием спин-поляризованного электрического тока, протекающего перпендикулярно плоскости диска (рис. 1*a*). Низкочастотная мода колебаний представляет собой гиротропное движение кора вихря вокруг центра диска. Данное возбуждение реализуется только в том случае, если направление тока и полярность кора вихря сов-

падают (вне зависимости от направления завихренности оболочки вихря). Стационарные автоколебания устанавливаются при достижении условия $|\mathbf{T}_S| = |\mathbf{T}_D|$. Амплитуда и частота гирации увеличиваются с увеличением плотности тока накачки. При некотором критическом токе происходит резкое изменение направления поляризации кора вихря и осцилляции затухают [38, 39]. По результатам моделирования установлено, что для выбранных параметров диска пороговый ток начала автоколебаний составляет $j_{Start} = 1.067 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$, а критический ток прекращения гирации равен $j_{Stop} = 1.628 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. Магнитное поле тока накачки по-разному влияет на колебания магнитного вихря, увеличивая или уменьшая частоту гирации в зависимости от направления завихренности оболочки. Обычно для оценки этого поля используется модель бесконечного проводника с током [40]. Однако для рассматриваемых нами дисков длина канала тока составляет $l \sim 25 \text{ нм}$, что при плотности тока 10^{11} A/m^2 и радиусе диска $r \sim 250 \text{ нм}$ дает оценку поля на краю диска 15 Э . Такое поле слабо влияет на динамику магнитного вихря и в дальнейшем не учитывалось.

3.2. Гиротропные автоколебания вихрей с различной завихренностью

В системе двух дисков параметры j_{Start} и j_{Stop} зависят от параметра ν вследствие взаимодействия между вихрями. Зависимости критических токов j_{Start} и j_{Stop} от величины перекрытия для случая, когда завихренности оболочек вихрей имеют противоположные направления, представлены на рис. 4а. Наблюдается убывание этих величин с уменьшением расстояния между центрами дисков. Энергия

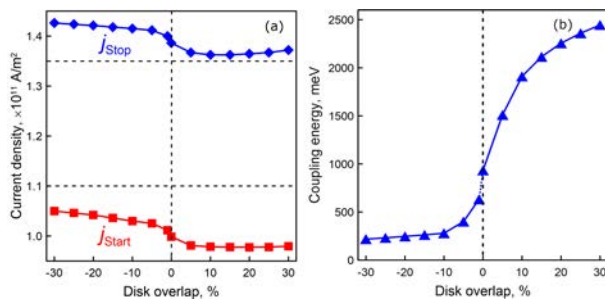


Рис. 4. а) Зависимости критических токов j_{Start} (квадраты) и j_{Stop} (ромбы) от величины перекрытия дисков (VV-состояние). Горизонтальные линии обозначают границы области токов, в которой далее исследовалась дефазировка гирации вихрей. б) Зависимость энергии взаимодействия для VV-состояния от перекрытия. Плотность тока накачки $j_0 = 1.225 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$

взаимодействия вихрей также зависит от расстояния между центрами дисков (она определялась как разность между энергией колебаний в двух дисках и удвоенной энергией колебаний намагниченности в изолированном диске [18]). При положительном перекрытии дисков ($\nu > 0$) между вихрями возникает дополнительное обменное взаимодействие и полная энергия взаимодействия резко увеличивается (рис. 4б).

В конфигурации VV с положительной полярностью кóров гирация вихрей происходит вокруг состояний равновесия вблизи центров дисков против часовой стрелки. Фазы вращения кóров сдвинуты на 180 градусов, в то время как средние магнитные моменты, возникающие в плоскости дисков, вращаются синфазно (рис. 5) [41].

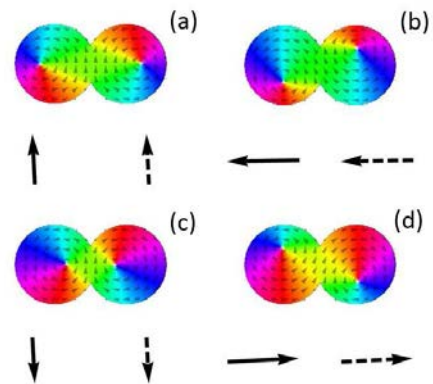


Рис. 5. Последовательные моментальные снимки состояний VV при возбуждении автоколебаний и соответствующие наведённые магнитные моменты

Для анализа фазовых характеристик гирации вихрей мы исследовали установившиеся гиротропные колебания при изменении величины разности токов накачки и при различных расстояниях между дисками. С этой целью к каждому из дисков прикладывались небольшие (1 Э) ортогональные магнитные поля, направленные вдоль осей x и y , которые вызывали смещение вихрей и обеспечивали начальную разность фаз гирации близкую 90 градусам. Затем включался ток накачки и поля выключались. После установления стационарного режима определялась стационарная разность фаз гирации вихрей. Осциллирующий средний магнитный момент в каждом диске описывался комплексной величиной

$$m_n = m_{nx} + im_{ny}, \quad (7)$$

где m_n — индуцированный магнитный момент в первом и втором диске ($n = 1, 2$). Разность фаз осцилляций в дисках определялась по формуле

$$\Delta\varphi_{1,2} = \arg(m_1) - \arg(m_2). \quad (8)$$

Если токи накачки, протекающие в каждом из дисков, равны ($j_1 = j_2$), то разность фаз равна нулю и индуцированные магнитные моменты вращаются синхронно. Если же $j_1 \neq j_2$, то появляется разность фаз, зависящая как от разности токов в дисках, так и от их взаимного расположения.

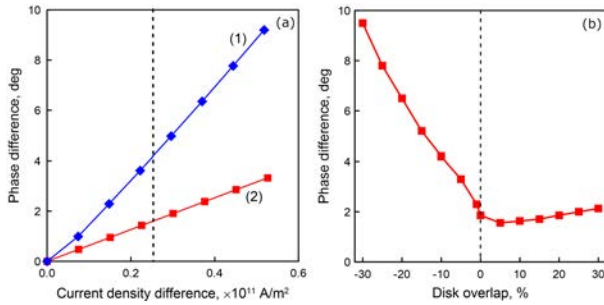


Рис. 6. *a)* Зависимости разности фаз от разности токов накачки для состояния VV. Зависимость 1 для $\nu = -10\%$; 2 для $\nu = +10\%$. Вертикальная пунктирная линия соответствует разности токов, обозначенных пунктирными линиями на рис. 4*a*. *b)* Зависимость разности фаз от перекрытия дисков для состояния VV. Разность токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$

При моделировании плотность тока в каждом из дисков изменялась относительно среднего значения

$$j_{1,2} = j_0 \pm \Delta j, \quad (9)$$

где j_0 — средняя плотность тока, протекающего через диски (при моделировании она выбиралась равной $j_0 = 1.225 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$). На рис. 6*a* представлены зависимости разности фаз $\Delta\varphi$ от разности токов Δj при различных перекрытиях дисков. Как видно на рисунке, эти зависимости близки к линейным. Отметим, что даже при выходе значений токов накачки из области генерации $j_1 < j_{\text{Start}}$ и $j_2 > j_{\text{Stop}}$ автоколебания продолжаются. Как показали моделирование, для генерации автоколебаний достаточно выполнения следующего условия для среднего значения плотности тока $j_{\text{Start}} < j_0 < j_{\text{Stop}}$. На рис. 6*b* показана зависимость разности фаз от расстояния между дисками при фиксированной разности токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. При этом токи в каждом диске находились вблизи края области генерации $j_1 = 1.10 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$ и $j_2 = 1.35 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$ (помечены горизонтальными пунктирными линиями на рис. 4*a*). На рисунке видно, что разность фаз монотонно убывает от значения $\Delta\varphi = 9.5^\circ$, при относительно большом расстоянии между дисками ($\nu = -30\%$) до минимального значения 1.9° для перекрывающихся дисков. Таким образом, увеличение энергии связи, как и ожидалось, приводит к улучшению условий синхронизации гирации вихрей.

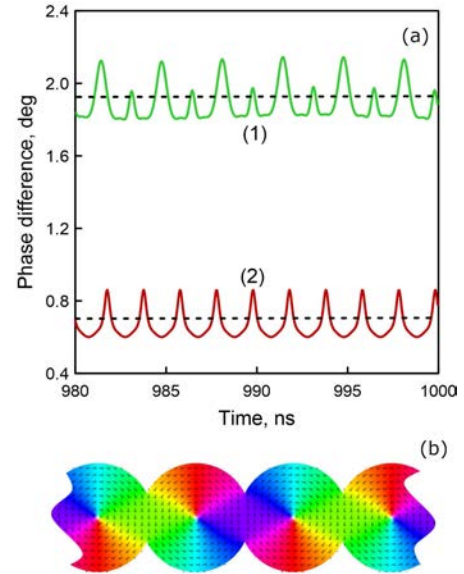


Рис. 7. *a)* Осциллограммы разности фаз гирации вихрей для состояния VV. Перекрытие $\nu = +10\%$, разность токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. Осциллограмма 1 для осцилляций разности фаз в двойном диске, осциллограмма 2 для бесконечной цепочки дисков. *b)* Фрагмент цепочки вихрей с переменным направлением завихренности

Однако даже при сильной связи между дисками наблюдаются достаточно большие пульсации разности фаз, обусловленные неизохронным вращением кóров вихрей, связанным с асимметричной формой двойного диска. На рис. 7*a* представлена осциллограмма разности фаз (кривая 1) для перекрытия $\nu = +10\%$ и разности токов $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. При данных параметрах среднее значение разности фаз составляет 1.9° . Амплитуда колебаний разности фаз составляет 0.3° . Влияние фактора асимметрии системы можно снизить, объединяя диски в одномерную цепочку (рис. 7*b*). Осциллограмма колебаний разности фаз для цепочки дисков приведена на рис. 7*a* (кривая 2). Как видно, при тех же значениях Δj и ν в цепочке средняя разность фаз и амплитуда пульсаций уменьшаются и составляют соответственно 0.9° и 0.2° .

3.3. Гиротропные колебания вихрей с одинаковой завихренностью

Автоколебания вихрей с одинаковой завихренностью при $\nu < 0$ происходят синфазно, при этом ко́ры вращаются против часовой стрелки. Когда диски перекрываются ($\nu > 0$), между вихрями формируется антивихрь и реализуется состояние VAV. В этом случае мода колебаний представляет собой сфазированное движение кóров вихрей против часовой и

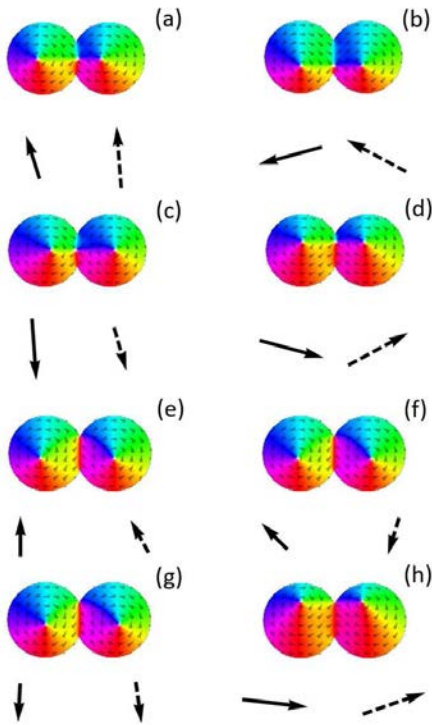


Рис. 8. Последовательные моментальные снимки состояний VAV (a–d) и sVV (e–h) при возбуждении автоколебаний и соответствующие наведённые магнитные моменты

кора антивихря по часовой стрелке (рис. 8a–d). Антивихрь представляет собой метастабильное состояние, которое разрушается относительно малыми токами накачки. После “выхода” антивихря за пределы дисков формируется состояние sVV, в котором вихри сдвинуты из центров дисков (рис. 8e–h).

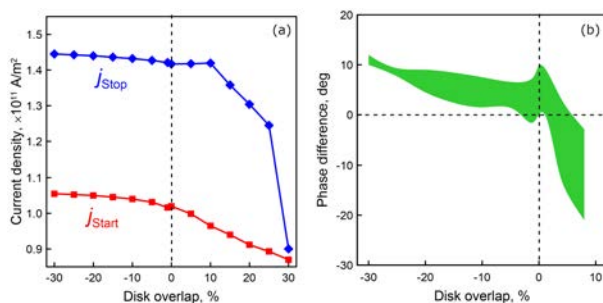


Рис. 9. a) Зависимости критических токов j_{Start} (квадраты) и j_{Stop} (ромбы) от перекрытия дисков для вихрей с одинаковой завихренностью. Состояние sVV. b) Зависимость разности фаз от перекрытия дисков. Разность токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$

На рис. 9a показана зависимость критических токов j_{Start} и j_{Stop} для системы двух вихрей с одинаковой завихренностью от расстояния между дисками. В этом случае наблюдается более сильная зависи-

мость от перекрытия в области $\nu > 0$, чем для вихрей с разной завихренностью. Кроме того, наблюдается очень сильная зависимость разности фаз колебаний вихрей от расстояния между дисками. На рис. 9b приведена зависимость разности фаз $\Delta\varphi$ от перекрытия дисков ν при разности токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. Толщина линии на рисунке показывает амплитуду пульсаций $\Delta\varphi$. На рисунке видно, что при перекрытии дисков разность фаз меняет знак и продолжает нарастать.

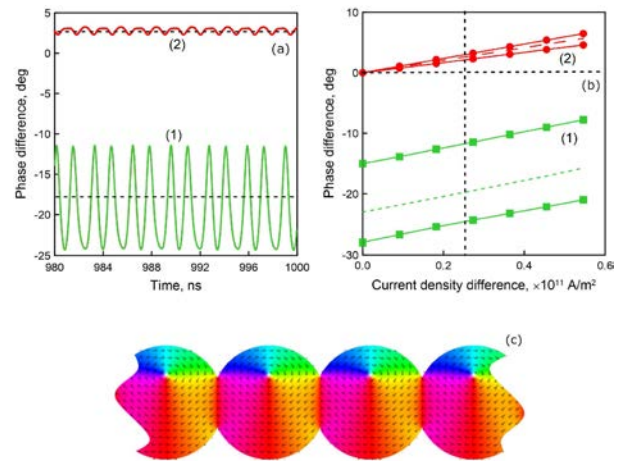


Рис. 10. a) Осциллограммы разности фаз гирации вихрей для состояния sVV. Перекрытие $\nu = +10\%$, разность токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. Осциллограмма 1 для осцилляций разности фаз в двойном диске, осциллограмма 2 для бесконечной цепочки дисков. b) Зависимости разности фаз от разности токов накачки для вихрей с одинаковой завихренностью. Параметр перекрытия $\nu = +10\%$. На кривых 1 сплошные линии (квадраты) показывают зависимость максимума и минимума разности фаз $\Delta\varphi$, пунктиром показана зависимость среднего значения $\Delta\varphi$. На кривых 2 сплошные линии (круги) показывают зависимость максимума и минимума разности фаз $\Delta\varphi$ для цепочки дисков, пунктиром показана зависимость среднего значения $\Delta\varphi$. Вертикальная пунктирная линия соответствует разности токов $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. c) Фрагмент цепочки вихрей с одинаковым направлением завихренности

На рис. 10a представлена осциллограмма (кривая 1) разности фаз колебаний вихрей в состоянии sVV в двойном диске для перекрытия $\nu = +10\%$ и разности токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ A/m}^2$. Среднее значение разности фаз составляет 17.5° . Амплитуда пульсации разности фаз составляет 13° . Отметим, что амплитуда пульсаций разности фаз практически не зависит от разности токов накачки (рис. 10b, кривые 1) и равна 13° даже при одинаковых токах. Объединение дисков в одномерную

цепочку (рис. 10с) также приводит к значительному уменьшению среднего значения и амплитуды пульсаций разности фаз. Осциллограмма колебаний разности фаз для цепочки дисков приведена на рис. 10а (кривая 2). Как видно, при тех же значениях Δj и ν в цепочке средняя разность фаз и амплитуда пульсаций уменьшаются и составляют соответственно 2.5° и 1° . Зависимость этих величин от разности токов накачки линейная (рис. 10b, кривые 2).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, методом микромагнитного моделирования исследованы гиротропные автоколебания магнитных вихрей во взаимодействующих ферромагнитных дисках.

Показано, что пространственно-временная структура коллективной гиротропной моды автоколебаний в двойных дисках зависит от взаимной ориентации вихревых оболочек. Когда вихри имеют разную завихренность (VV), вращение кóров с положительной полярностью происходит против часовой стрелки со сдвигом фаз на 180 градусов. В случае же, когда завихренности одинаковы (sVV), вращение кóров также происходит против часовой стрелки, но синфазно. Тем не менее, только в состоянии VV индуцированные в вихревых оболочках магнитные моменты вращаются синфазно, поэтому именно это состояние является перспективным для использования в фазовой синхронизации ВСТНО. Отметим, что направлением завихренности оболочек вихрей можно управлять, изменяя форму ферромагнитного диска [42].

Особое внимание уделено фазовым характеристикам гирации вихрей при различных значениях возбуждающего спин-поляризованного тока. Даже небольшая разница токов накачки в соседних дисках приводит к расфазировке вращения индуцированных магнитных моментов. Данный эффект обусловлен разностью скоростей вращения кóров вследствие разности токов накачки. Условия для фазовой синхронизации в системе VV значительно лучше, чем в системе sVV, поскольку автоколебания вихрей с одинаковой завихренностью демонстрируют значительную разность фаз и амплитуду ее пульсаций даже при нулевой разности возбуждающих токов.

Важной особенностью гиротропных колебаний намагниченности двух перекрывающихся дисков является неизохронность вращения вихрей, связанная с асимметрией формы системы. Это приводит к до-

полнительной расфазировке гирации вихрей и пульсациям разности фаз. Как показало моделирование, влияние этого нежелательного фактора может быть значительно снижено посредством объединения дисков в одномерную цепочку. Такое объединение уменьшает как степень расфазировки, так и амплитуду пульсаций разности фаз. Также важным результатом является наблюдаемая сильная зависимость разности фаз гиротропного движения вихрей от степени перекрытия дисков. Показано, что обменная связь значительно уменьшает разность фаз гирации. Так, например, при разности токов накачки $\Delta j = 0.25 \cdot 10^{11} \text{ А/м}^2$ эта разность для состояний VV составляет $\Delta\varphi_{+10} = 1.63^\circ$ для перекрытия $\nu = +10\%$ и $\Delta\varphi_{-10} = 4.20^\circ$ для $\nu = -10\%$. Это является важным фактором, поскольку при объединении N дисков в одномерную цепочку даже небольшая разность фаз приводит к значительной потере генерируемой мощности вследствие кубической зависимости дисперсии фазы осцилляторов от их числа. Для сравнения приведем оценку выигрыша мощности при снижении разности фаз с $\Delta\varphi_{+10}$ до $\Delta\varphi_{-10}$ на основе модели Курамото [30]. Отношение генерируемой мощности для перекрытий $\pm 10\%$ составляет

$$\frac{P_{-10}}{P_{+10}} \approx \exp \left\{ -(\Delta\varphi_{-10}^2 - \Delta\varphi_{+10}^2) N^3 \right\}. \quad (10)$$

Например, для $N = 10$ это отношение равно 100 . Таким образом, можно ожидать, что перекрытие дисков приведет к улучшению фазовой синхронизации цепочек ВСТНО и возрастанию генерируемой мощности.

Благодарности. Авторы благодарят Е. А. Караштина, Е. В. Скороходова и Р. В. Горева за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00271).

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Zeng, G. Finocchio, and H. Jiang, *Nanoscale* **5**, 2219 (2013).
2. T. Chen, R. Dumas, A. Eklund, P. Muduli, A. Houshang, A. Awad, P. Durrenfeld, B. Malm, A. Rusu, and J. Akerman, *Proc. IEEE* **104**, 7505988 (2016).
3. J. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* **159**, L1 (1996).

4. L. Berger, *Phys. Rev. B* **54**, 9353 (1996).
5. S. Kiselev, J. Sankey, I. Krivorotov, N. Emley, R. Schoelkopf, R. Buhrman, and D. Ralph, *Nature* **425**, 380 (2003).
6. W. Rippard, M. Pufall, S. Kaka, S. Russek, and T. Silva, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 272011 (2004).
7. A. Deac, A. Fukushima, H. Kubota, H. Maehara, Y. Suzuki, S. Yuasa, Y. Nagamine, K. Tsunekawa, D. Djayaprawira, and N. Watanabe, *Nature Phys.* **4**, 803, (2008).
8. A. Nazarov, H. Olson, H. Cho, K. Nikolaev, Z. Gao, Stokes, S., and B. Pant, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 162504 (2006).
9. D. Houssameddine, S. Florez, J. Katine, J. Michel, U. Ebels, D. Mauri, O. Ozatay, B. Delaet, B. Viala, L. Folks, B. Terris, and M. Cyrille, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 022505 (2008).
10. V. Pribiag, I. Krivorotov, G. Fuchs, P. Braganca, O. Ozatay, J. Sankey, D. Ralph, and R. Buhrman, *Nature Phys.* **3**, 498 (2007).
11. R. Lehnendorff, D. Burgler, S. Gliga, R. Hertel, P. Grunberg, C. Schneider, and Z. Celinski, *Phys. Rev. B* **80**, 054412 (2009).
12. A. Dussaux, B. Georges, J. Grollier, V. Cros, A. Khvalkovskiy, A. Fukushima, M. Konoto, H. Kubota, K. Yakushiji, S. Yuasa, K. Zvezdin, K. Ando, and A. Fert, *Nature Commun.* **1**, 8 (2010).
13. S. Tsunegi, K. Yakushiji, A. Fukushima, S. Yuasa, and H. Kubota, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 252402 (2016).
14. F. Mancoff, N. Rizzo, B. Engel, and S. Tehrani, *Nature* **437**, 393 (2005).
15. Abreu F. Araujo, A. Belanovsky, P. Skirdkov, K. Zvezdin, A. Zvezdin, N. Locatelli, R. Lebrun, J. Grollier, V. Cros, De G. Loubens, and O. Klein, *Phys. Rev. B* **92**, 045419 (2015).
16. N. Locatelli, A. Hamadeh, Abreu F. Araujo, A. Belanovsky, P. Skirdkov, R. Lebrun, V. Naletov, K. Zvezdin, M. Munoz, J. Grollier, O. Klein, V. Cros, and G. De Loubens, *Sci. Rep.* **5**, 17039 (2015).
17. S. Kaka, M. Pufall, W. Rippard, T. Silva, S. Russek, and J. Katine, *Nature* **437**, 389 (2005).
18. S. Erokhin and D. Berkov, *Phys. Rev. B* **89**, 144421 (2014).
19. A. Ruotolo, V. Cros, B. Georges, A. Dussaux, J. Grollier, C. Deranlot, R. Guillemet, K. Bouzehouane, S. Fusil, and A. Fert, *Nature Nanotech.* **4**, 528 (2009).
20. Q. Zhu, Q. Zheng, X. Liu, J. Wang, and Q. Liu, *J. Appl. Phys.* **117**, 173907 (2015).
21. T. Kendziorczyk, S. Demokritov and T. Kuhn, *Phys. Rev. B* **90**, 054414 (2014).
22. M. Kreissig, R. Lebrun, F. Protze, K. Merazzo-Jaimes, J. Hem, L. Vila, R. Ferreira, M. Cyrille, F. Ellinger, V. Cros, U. Ebels, and P. Bortolotti, *AIP Adv.* **7**, 056653 (2017).
23. Y. Li, X. De Milly, Abreu F. Araujo, O. Klein, V. Cros, J. Grollier, and G. De Loubens, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 247202 (2017).
24. S. Tsunegi, T. Taniguchi, R. Lebrun, K. Yakushiji, V. Cros, J. Grollier, A. Fukushima, S. Yuasa, and H. Kubota, *Sci. Rep.* **8**, 13475 (2018).
25. M. Riou, J. Torrejon, B. Garitane, F. Abreu Araujo, P. Bortolotti, V. Cros, S. Tsunegi, K. Yakushiji, A. Fukushima, H. Kubota, S. Yuasa, D. Querlioz, M. Stiles, and J. Grollier, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 024049 (2019).
26. H. Singh, A. Bose, S. Bhuktare, A. Fukushima, K. Yakushiji, S. Yuasa, H. Kubota, and A. Tulapurkar, *Phys. Rev. Appl.* **10**, 024001 (2018).
27. H. Singh, S. Bhuktare, A. Bose, A. Fukushima, K. Yakushiji, S. Yuasa, H. Kubota, and A. Tulapurkar, *Phys. Rev. Appl.* **11**, 054028 (2019).
28. A. Slavin and V. Tiberkevich, *IEEE Trans. Magn.* **45**, 1875 (2009).
29. A. Belanovsky, N. Locatelli, P. Skirdkov, F. Araujo, J. Grollier, K. Zvezdin, V. Cros, and A. Zvezdin, *Phys. Rev. B* **85**, 100409 (2012).
30. H. Hong, H. Park, and M. Choi, *Phys. Rev. E* **72**, 036217 (2005).
31. V. Flovik, F. Maclá, and E. Wahlstrom, *Sci. Rep.* **6** 32528 (2016).
32. H. Hata, M. Goto, A. Yamaguchi, T. Sato, Y. Nakatani, and Y. Nozaki, *Phys. Rev. B* **90**, 104418 (2014).
33. S. Jain, H. Schultheiss, O. Heinonen, F. Fradin, J. Pearson, S. Bader, and V. Novosad, *Phys. Rev. B* **86**, 214418 (2012).
34. J. Xiao, A. Zangwill, and M. Stiles, *Phys. Rev. B* **70**, 172405 (2004).
35. A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helsen, F. Garcia-Sanchez, and B. Van Waeyenberge, *AIP Adv.* **4**, 107133 (2014).
36. G. Abo, Y. Hong, J. Park, J. Lee, W. Lee, and B. Choi, *IEEE Trans. Magn.* **49**, 4937 (2013).

- 37.** M. Noske, H. Stoll, M. Fahnle, A. Gangwar, G. Woltersdorf, A. Slavin, M. Weigand, G. Dieterle, J. Forster, C. Back, and G. Schutz, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 037208 (2016).
- 38.** D. Sheka, Y. Gaididei, and F. Mertens, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 082509 (2007).
- 39.** K. Guslienکو, K. Lee, and S. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 027203 (2008).
- 40.** Y. Choi, S. Kim, K. Lee, and Y. Yu, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 182508 (2008).
- 41.** V. L. Mironov, D. A. Tatarskiy, A. D. Efimov, and A. A. Fraerman, *IEEE Trans. Magn.* **57**, 4300906 (2021).
- 42.** M. Schneider, H. Hoffmann, and J. Zweck, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3113 (2001).

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА НА ПОЛУОСИ

*В. В. Киселев**

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620041, Екатеринбург, Россия*

*Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 6 октября 2022 г.,
после переработки 8 ноября 2022 г.
Принята к публикации 8 ноября 2022 г.

В рамках модели Ландау–Лифшица методом обратной задачи рассеяния изучена нелинейная динамика полубесконечного изотропного ферромагнетика при частичном закреплении спинов на краю образца, а также в предельных случаях полного закрепления поверхностных спинов и в отсутствие такового. Предсказаны два типа солитонов. Первые из них представляют локализованные около поверхности образца колебания намагниченности с дискретными частотами. Второй класс содержит движущиеся частицеподобные объекты с деформируемыми ядрами, которые упруго отражаются от границы образца и на больших расстояниях от нее принимают форму типичных солитонов протяженного ферромагнетика. Найдены условия образования поверхностных солитонов. Проанализированы особенности столкновения солитонов с границей образца при разных степенях закрепления спинов на поверхности. Получена серия новых законов сохранения, которые гарантируют выполнение солитонами требуемых краевых условий, обеспечивают локализацию солитонов около поверхности образца или же отражение от нее.

DOI: 10.31857/S0044451023030094

EDN: QEPHBW

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие нелинейные модели теории магнетизма допускают представление в виде условия коммутативности двух дифференциальных операторов [1]. Такое представление (L – A -пара) позволяет с помощью метода обратной задачи рассеяния аналитически описать многообразие магнитных солитонов и нелинейных волн в протяженных образцах. К сожалению, эта техника мало пригодна для образцов конечных размеров. Поэтому к настоящему времени свойства солитонов вблизи границ образцов практически не изучены. Между тем, ядра солитонов не являются жесткими. В ходе взаимодействия с поверхностью образца солитоны меняют свою структуру и динамические свойства. В нелинейно-упругих стержнях экспериментально наблюдается отраже-

ние солитонов от концов стержня [2]. Такие же явления должны сопутствовать движению солитонов в магнитных пленках [3].

Для моделей, допускающих L – A -пару, полное решение начально-краевых задач на полуоси (при $0 \leq x < \infty$, где x — пространственная координата), возможно лишь для выделенного класса граничных условий, которые называют интегрируемыми [4–7]. При таких условиях задача на полуоси по определенной симметрии продолжается на всю ось $-\infty < x < \infty$ и далее решается техникой обратной задачи рассеяния, которая является обобщением метода изображений, используемого в электростатике для решения краевых задач с определенной пространственной симметрией.

Далее мы будем следовать процедуре, предложенной для построения решений нелинейного уравнения Шредингера на интервале $0 \leq x < \infty$ с интегрируемыми краевыми условиями [8, 9]. Преимущество метода — не только в прямой связи с традиционной схемой метода обратной задачи рассеяния, но и в том, что в отличие от других подходов [5, 10], он открывает принципиальную возмож-

* E-mail: kiseliev@imp.uran.ru

ность полного описания квазиодномерных магнитных солитонов и спиновых волн в полубезграничных образцах. Для гейзенберговского ферромагнетика и ферромагнетиков с квадратичной по намагниченности анизотропией допустимый класс интегрируемых граничных условий установлен в работе [11].

В настоящей работе мы изучим квазиодномерные солитоны и спиновые волны в полубесконечном образце гейзенберговского ферромагнетика с энергией

$$H = \frac{\alpha}{2} \int_0^{\infty} dx (\partial_x \mathbf{M})^2 + \beta M_3(x=0, t).$$

Здесь $\mathbf{M}(x, t)$ — намагниченность среды (причем $\mathbf{M}^2(x, t) = M_0^2 = \text{const}$), $\alpha > 0$ — обменная постоянная, $\beta \mathbf{e}$ — внешнее магнитное поле вдоль края $x = 0$ образца или эффективное поле поверхностных спинов, $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$, $0 \leq x < \infty$ и $0 \leq t < \infty$ — пространственная координата и время.

Введем нормированный вектор ферромагнетизма $\mathbf{n} = -\mathbf{M}/M_0$ и с помощью масштабных преобразований

$$x' = x/\sqrt{\alpha}, \quad t' = \gamma M_0 t, \quad \beta' = \beta/(M_0 \sqrt{\alpha})$$

перейдем к безразмерным переменным. Тогда энергия системы примет вид

$$H' = \frac{H}{M_0^2 \sqrt{\alpha}} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx' (\partial_{x'} \mathbf{n})^2 - \beta' n_3(x'=0, t'). \quad (1)$$

Распределения намагниченности в образце соответствуют решения уравнения Ландау – Лифшица:

$$\partial_{t'} \mathbf{n} = [\mathbf{n} \times \partial_{x'}^2 \mathbf{n}], \quad \mathbf{n}^2 = 1, \quad (2)$$

где $0 \leq x' < \infty$, $0 \leq t' < \infty$, с интегрируемыми краевыми условиями

$$\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{e}, \quad \partial_{x'} \mathbf{n} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad x' \rightarrow +\infty, \quad (3)$$

$$[\mathbf{n} \times (\partial_{x'} \mathbf{n} + \beta' \mathbf{e})]|_{x'=0} = 0 \quad (4)$$

и заданным начальным возмущением поля намагниченности:

$$\mathbf{n}(x', t'=0) = \mathbf{n}_0(x'). \quad (5)$$

Далее «штрихи» над безразмерными переменными опускаем.

При конечных значениях $\beta \neq 0$ смешанное краевое условие (4) учитывает частичное закрепление

спинов на границе $x = 0$ образца. При $\beta = 0$ оно отвечает задаче при свободных краевых спинах:

$$[\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n}]|_{x=0} = 0. \quad (6)$$

При $|\beta| \rightarrow \infty$ условие (4) соответствует полному закреплению спинов на границе образца:

$$n_3|_{x=0} = \pm 1. \quad (7)$$

Выбор знака в правой части (7) конкретизируем в ходе дальнейшего анализа.

Отметим, что в работе [12] было предсказано и проанализировано простейшее нелинейное возбуждение, локализованное вблизи конца полуграниченной спиновой цепочки. Рассмотренная модель в континуальном приближении эквивалентна уравнению Ландау – Лифшица для ферромагнетика со слабой анизотропией типа «легкая ось». Ее приближенное решение найдено при динамическом краевом условии, учитывающем отсутствие у краевого спина соседей в области $x < 0$. В данной работе обсуждается нелинейная динамика изотропного ферромагнетика на полуоси $0 < x < \infty$ с краевыми условиями, которые описывают частичное закрепление спинов на границе образца.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены формулы, необходимые для аналитического описания солитонов и волн в полубесконечном гейзенберговском ферромагнетике. В разд. 3 построены и исследованы два новых класса солитонов. Первый из них содержит мультисолитоны, локализованные вблизи границы $x = 0$ образца. Они обладают специфическими частотами и особенностями модуляции. Второй класс — это движущиеся частицеподобные объекты, которые испытывают упругие столкновения друг с другом и с границей образца. В разд. 4 выполнено разделение переменных, после которого все интегралы движения в полубесконечном образце записываются в виде суммы дискретных вкладов от солитонов и квазичастиц непрерывного спектра спиновых волн. Найдены дополнительные законы сохранения, которые гарантируют выполнение солитонами верных краевых условий.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для включения начально-краевой задачи (2)–(5) в классическую схему метода обратной задачи рас-

сеяния поле $\mathbf{n}(x, t)$ продолжим четным образом на отрицательную полуось:

$$\mathbf{S}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{n}(x, t), & x \geq 0, \\ \mathbf{n}(-x, t), & x < 0. \end{cases} \quad (8)$$

Полученное распределение $\mathbf{S}(x, t)$ будет непрерывным, но его производные могут иметь скачки в точке $x = 0$. Новое поле $\mathbf{S}(x, t)$, как и прежнее $\mathbf{n}(x, t)$, удовлетворяет уравнению Ландау–Лифшица (2) при $x \neq 0$. Краевое условие (4) для $\mathbf{n}(x, t)$ в терминах $\mathbf{S}(x, t)$ принимает смысл связи:

$$[\mathbf{S} \times (\Delta \partial_x \mathbf{S} + 2\beta S_3 \mathbf{e})]_{|x=0} = 0, \quad (9)$$

где

$$S_3|_{x=0} = n_3|_{x=+0}, \\ \Delta \partial_x \mathbf{S} = \partial_x \mathbf{n}|_{x=+0} - \partial_x \mathbf{n}|_{x=-0} = 2\partial_x \mathbf{n}|_{x=+0}.$$

Напомним, что в отсутствие связи (9), когда все производные функции $\mathbf{S}(x, t)$ непрерывны в точке $x = 0$, уравнение Ландау–Лифшица для расчета поля $\mathbf{S}(x, t)$ на оси $-\infty < x < \infty$ эквивалентно условию коммутативности двух операторов [13]:

$$[\partial_x - L, \partial_t - A] = 0, \quad (10)$$

где

$$L = \frac{\lambda}{2i} S_k \sigma_k, \quad A = \frac{1}{2i} (-\lambda^2 S_p + \lambda [\mathbf{S} \times \partial_x \mathbf{S}]) \sigma_p,$$

σ_k — матрицы Паули ($k = 1, 2, 3$), по дважды повторяющимся индексам проводится суммирование, λ — комплексный спектральный параметр. Соотношение (10) можно переписать в проинтегрированном виде:

$$\partial_t T_0(x, y, \lambda) = A(x, \lambda) T_0(x, y, \lambda) - T_0(x, y, \lambda) A(y, \lambda). \quad (11)$$

Здесь $T_0(x, y, \lambda)$ — матрица трансляции вдоль оси x . Она определяется уравнением

$$\partial_x T_0(x, y, \lambda) = L(x, \lambda) T_0(x, y, \lambda) \quad (12)$$

с условием $T_0(x, x, \lambda) = I$, где I — единичная матрица. Из уравнения (12) с учетом нормировки T_0 и бесследовости матрицы L следует унимодулярность матрицы трансляции:

$$\det T_0(x, y, \lambda) = 1.$$

Кроме того, $T_0(x, y, \lambda = 0) = I$ при любых значениях x и y . Для упрощения формул здесь и далее,

где это не вызывает недоразумений, не указываем зависимость матричных функций от времени t .

В [11] показано, что связь (9) эквивалентна равенству

$$A_+(\lambda)K(\lambda) - K(\lambda)A_-(\lambda) = 0, \quad (13)$$

где $A_{\pm}(\lambda) \equiv A(x, \lambda)|_{x=\pm 0}$, $K(\lambda) = \lambda I + i\beta\sigma_3$. Следуя [8,9], для учета ограничения (13) модифицируем матрицу трансляции вдоль оси x :

$$T(x, y, \lambda) = \begin{cases} T_0(x, y, \lambda), & xy > 0, \\ T_0(x, +0, \lambda)K(\lambda)T_0(-0, y, \lambda), & x > 0 > y, \\ T_0(x, -0, \lambda)K^{-1}(\lambda)T_0(+0, y, \lambda), & x < 0 < y, \end{cases} \quad (14)$$

Новая матрица переноса не является унимодулярной:

$$\det T(x, y, \lambda) = [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x - \text{sign } y)/2}. \quad (15)$$

Для нее справедливы соотношения

$$\begin{aligned} T(x, x, \lambda) &= I \quad \text{при } x \neq 0, \\ T(x, y, \lambda) &= T^{-1}(y, x, \lambda), \\ T(+0, -0, \lambda) &= T^{-1}(-0, +0, \lambda) = K(\lambda). \end{aligned} \quad (16)$$

Важно, что коммутационное представление (10) уравнения Ландау–Лифшица при $x \neq 0$:

$$\partial_t \mathbf{S} = [\mathbf{S} \times \partial_x^2 \mathbf{S}], \quad \mathbf{S}^2 = 1, \quad (17)$$

вместе со связью (9) эквивалентны уравнениям

$$\begin{aligned} \partial_x T(x, y, \lambda) &= L(x, \lambda) T(x, y, \lambda), \\ \partial_y T(x, y, \lambda) &= -T(x, y, \lambda) L(y, \lambda), \\ \partial_t T(x, y, \lambda) &= A(x, \lambda) T(x, y, \lambda) - T(x, y, \lambda) A(y, \lambda), \end{aligned} \quad (18)$$

которые совпадают с таковыми для прежней матрицы переноса $T_0(x, y, \lambda)$ в случае дифференцируемого поля $\mathbf{S}(x, t)$. Это позволяет включить краевую задачу (2)–(5) на полуоси в схему обратной задачи рассеяния на всей оси $-\infty < x < \infty$.

Введем матричные функции Йоста прямой задачи рассеяния:

$$\begin{aligned} T_{\pm}(x, \lambda, t) &= \lim_{y \rightarrow \pm \infty} \left[T(x, y, \lambda) \exp \left(-\frac{i\lambda y}{2} \sigma_3 \right) \right], \\ \det T_{\pm}(x, \lambda) &= [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x \mp 1)/2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Они служат базисными решениями вспомогательной линейной системы

$$\partial_x T_{\pm} = L(\lambda) T_{\pm} \quad (20)$$

с асимптотиками

$$T_{\pm}(x, t, \lambda) \rightarrow \exp\left(-\frac{i\lambda x \sigma_3}{2}\right) \quad \text{при } x \rightarrow \pm\infty, \quad (21)$$

которые согласованы с краевым условием (3) для уравнения Ландау–Лифшица (2) при $x \rightarrow +\infty$.

Свойства симметрии матриц $K(\lambda)$, $A(\lambda)$, $L(\lambda)$

$$\begin{aligned} K^*(\lambda^*) &= \sigma_2 K(\lambda) \sigma_2, \\ A^*(\lambda^*) &= \sigma_2 A(\lambda) \sigma_2, \\ L^*(\lambda^*) &= \sigma_2 L(\lambda) \sigma_2 \end{aligned}$$

приводят к первому ограничению на решения Йоста:

$$T_{\pm}^*(x, \lambda^*) = \sigma_2 T_{\pm}(x, \lambda) \sigma_2, \quad (22)$$

которое совпадает с таковым для поля $\mathbf{S}(x, t)$ без особенности в точке $x = 0$.

Четность продолжения (8) проявляется в дополнительной симметрии матриц:

$$\begin{aligned} A(-x, -\lambda) &= A(x, \lambda), \\ L(-x, -\lambda) &= -L(x, \lambda), \\ (\lambda^2 + \beta^2) K^{-1}(\lambda) &= -K(-\lambda), \end{aligned}$$

которая дает вторую редукцию для решений Йоста:

$$T_{\pm}(x, \lambda) = \pm \text{sign } x T_{\mp}(-x, -\lambda) [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x \mp 1)/2}. \quad (23)$$

На вещественной λ -оси решения Йоста связаны матрицей перехода $T(\lambda)$:

$$T_{-}(x, \lambda) = T_{+}(x, \lambda) T(\lambda). \quad (24)$$

Ее алгебраическую структуру определяют свойства (19), (22), (23)

$$\begin{aligned} T(\lambda) &= \begin{pmatrix} a(\lambda) & -\bar{b}(\lambda) \\ b(\lambda) & \bar{a}(\lambda) \end{pmatrix}, \\ a(\lambda)\bar{a}(\lambda) + b(\lambda)\bar{b}(\lambda) &= \lambda^2 + \beta^2, \\ \bar{a}(\lambda) &= a^*(\lambda), \quad \bar{b}(\lambda) = b^*(\lambda), \quad a^*(-\lambda) = -a(\lambda), \\ b(-\lambda) &= b(\lambda), \quad \lambda \in R. \end{aligned} \quad (25)$$

Далее мы обоснуем (25) и конкретизируем приведенные в (28), (29) аналитические продолжения с вещественной λ -оси редукций на функции $a(\lambda)$, $\bar{a}(\lambda)$.

Учитывая, что

$$T_0(x, y, \lambda = 0) = I, \quad K(\lambda = 0) = i \sigma_3 \beta,$$

из представлений (14), (19), (24) получаем нормировочное условие для матрицы перехода:

$$T(\lambda = 0) = i \sigma_3 \beta, \quad (26)$$

которое отличается от имевшегося для поля $\mathbf{S}(x, t)$ без особенности в точке $x = 0$ [13].

На вещественной λ -оси функции $T_{\pm}(x, \lambda)$ осциллируют. Поэтому значения $\lambda \in R$ соответствуют непрерывному спектру задачи (20), (21).

Первый $T_{-}^{(1)}(x, \lambda)$ и второй $T_{+}^{(2)}(x, \lambda)$ столбцы решений Йоста аналитически продолжаются с вещественной оси в область $\text{Im } \lambda > 0$. Вторым $T_{-}^{(2)}(x, \lambda)$ и первым $T_{+}^{(1)}(x, \lambda)$ столбцы будут аналитическими функциями в нижней полуплоскости $\text{Im } \lambda < 0$, кроме, возможно, простых полюсов функции $T_{+}(x, \lambda)$ при $x < 0$ в точках $\lambda = \pm i\beta$, унаследованных от матрицы $K^{-1}(\lambda)$ (см. (14), (19)).

Связь решений Йоста (24) приводит к формуле

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= \frac{\det[T_{-}^{(1)}(x, \lambda), T_{+}^{(2)}(x, \lambda)]}{\det T_{+}(x, \lambda)} = \\ &= [\lambda^2 + \beta^2]^{(1 - \text{sign } x)/2} \det[T_{-}^{(1)}(x, \lambda), T_{+}^{(2)}(x, \lambda)]. \end{aligned} \quad (27)$$

Отсюда заключаем, что функция $a(\lambda)$ допускает аналитическое продолжение с вещественной λ -оси в область $\text{Im } \lambda > 0$, где в общем случае имеет нули, которые будем предполагать простыми. Кроме того, она может иметь нуль в точке $\lambda = i|\beta|$ (см. (14), (19)). Как и в задаче без особенностей поля $\mathbf{S}(x, t)$ [1, 13], элемент $\bar{a}(\lambda)$ матрицы перехода аналитически продолжается с вещественной λ -оси в область $\text{Im } \lambda < 0$, где выражается через $a(\lambda^*)$ (25):

$$\bar{a}(\lambda) = a^*(\lambda^*). \quad (28)$$

Редукции (22), (23) на решения Йоста порождают дополнительную симметрию элемента $a(\lambda)$ матрицы перехода:

$$a^*(-\lambda^*) = -a(\lambda), \quad \text{Im } \lambda > 0. \quad (29)$$

Следствием (29) будут ограничения на положения нулей $\lambda = \lambda_j$ функции $a(\lambda)$, которых не было в задаче без особенностей поля $\mathbf{S}(x, t)$ в точке $x = 0$. Нули либо являются чисто мнимыми:

$$\lambda_j = \{i\nu_s\}, \quad \nu_s > 0, \quad s = 1, 2, \dots, M, \quad (30)$$

либо входят парами:

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \{\lambda_k, -\lambda_k^*\}, \quad \text{Im } \lambda_k > 0, \\ k &= 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, 2N. \end{aligned} \quad (31)$$

Полюсы функции $a(\lambda)$ совпадают с нулями $\bar{a}(\lambda)$. Согласно (28), они находятся в точках $\lambda = \lambda_j^*$.

Из представления (27) следует, что условие $a(\lambda_j) = 0$ означает пропорциональность столбцов $T_{-}^{(1)}(x, \lambda_j)$ и $T_{+}^{(2)}(x, \lambda_j)$:

$$T_{-}^{(1)}(x, \lambda_j) = \gamma(\lambda_j) T_{+}^{(2)}(x, \lambda_j). \quad (32)$$

Формула (32) определяет столбцы – решения вспомогательной системы (20), которые экспоненциально убывают при $x \rightarrow \pm\infty$. Это означает, что набор чисел $\{\lambda_j\}$ соответствует дискретному спектру прямой задачи рассеяния.

Продолжение комбинации равенств (22), (23) с вещественной λ -оси в комплексную плоскость приводит к дополнительной симметрии:

$$T_{\pm}(x, \lambda) = \pm \text{sign } x \sigma_2 T_{\mp}^*(-x, -\lambda^*) \times \times \sigma_2 [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x \mp 1)/2}, \quad (33)$$

где значения λ выбираются в областях аналитичности соответствующих столбцов. В частности, из (33) находим

$$\begin{aligned} T_{-}^{(1)}(x, \lambda) &= -i \text{sign } x \sigma_2 \times \\ &\times T_{+}^{(2)*}(-x, -\lambda^*) [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x + 1)/2}, \\ T_{+}^{(2)}(x, \lambda) &= -i \text{sign } x \sigma_2 \times \\ &\times T_{-}^{(1)*}(-x, -\lambda^*) [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x - 1)/2}, \end{aligned} \quad (34)$$

где $\text{Im } \lambda > 0$.

С помощью (34) устанавливаем ограничение на выбор нормировочных множителей γ_j в соотношении (32). Для мнимых нулей функции $a(\lambda)$ имеем

$$|\gamma(i\nu_s)|^2 = \beta^2 - \nu_s^2 > 0, \quad s = 1, 2, \dots M. \quad (35)$$

Для комплексных нулей (31) получаем

$$\gamma(\lambda_k) \gamma(-\lambda_k^*) = \lambda_k^2 + \beta^2, \quad k = 1, 2, \dots N. \quad (36)$$

Соотношение (35) выполняется только при $|\beta| > \max \nu_s > 0$.

Элемент $a(\lambda)$ матрицы перехода восстанавливается по его нулям, полюсам, коэффициенту отражения $b(\lambda)$ и асимптотическому поведению при больших λ [13]:

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= (\lambda + i\alpha) \prod_{s=1}^M \left(\frac{\lambda - i\nu_s}{\lambda + i\nu_s} \right) \prod_{k=1}^N \frac{(\lambda - \lambda_k)(\lambda + \lambda_k^*)}{(\lambda + \lambda_k)(\lambda - \lambda_k^*)} \times \\ &\times \exp \left(\frac{\lambda}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \frac{\ln[1 - |b(\mu)|^2 (\mu^2 + \beta^2)^{-1}]}{\mu(\mu - \lambda)} \right), \\ &\text{Im } \lambda > 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Для выполнений нормировочного условия (26) вещественный параметр α в (37) должен быть связан с β равенством

$$\beta = \alpha (-1)^M, \quad (38)$$

которое зависит только от четности числа M мнимых нулей коэффициента $a(\lambda)$.

С помощью вспомогательной линейной задачи (20), (21) мы построили отображение решений $\mathbf{n}(x, t)$ уравнения Ландау – Лифшица на полуоси в набор данных рассеяния. Он включает спектральные плотности $b(\lambda)$, $-\infty < \lambda < +\infty$, дискретные нули $\{\lambda_j\}$ коэффициента $a(\lambda)$ ($\text{Im } \lambda_j > 0$) и нормировочные множители $\{\gamma(\lambda_j)\}$. В терминах данных рассеяния задача интегрирования уравнения Ландау – Лифшица сводится к решению линейных дифференциальных уравнений. Из последнего уравнения (18) вытекает привычная зависимость данных рассеяния от времени [1, 13]:

$$\begin{aligned} a(t, \lambda) &= a(0, \lambda), \\ b(t, \lambda) &= b(0, \lambda) e^{-i\lambda^2 t}, \\ \gamma(\lambda_j, t) &= \gamma(0, \lambda_j) e^{-i\lambda_j^2 t}. \end{aligned} \quad (39)$$

Значения постоянных интегрирования $b(0, \lambda)$, $\gamma(0, \lambda_j)$ находим из уравнений (20), (24) по заданному начальному распределению намагниченности (5).

С физической точки зрения, спектральная плотность $b(\lambda, t)$ параметризует спин-волновые цуги, которые расплываются с течением времени из-за преобладания эффектов дисперсии над эффектами сжатия нелинейных волновых пакетов. Нули λ_j параметризуют структурно устойчивые магнитные солитоны. Чисто солитонным состояниям в отсутствие диспергирующих волн соответствует коэффициент $a(\lambda)$ с нулями при условии $b(\lambda) = \bar{b}(\lambda) \equiv 0$.

Возвращение от данных рассеяния к полю $\mathbf{S}(x, t)$ осуществляется по стандартной схеме обратной задачи рассеяния с учетом дополнительных редукций, порожденных симметрией продолжения поля $\mathbf{n}(x, t)$ на бесконечный интервал. Обратные отображения для расчета реальных полей $\mathbf{n}(x, t)$ в области $x > 0$ и фиктивных полей $\mathbf{S}(x, t)$ при $x < 0$ оказываются разными. В то же время, замечательная черта подхода [8, 9] состоит в том, что вычисления реальных и фиктивных полей выполняются независимо.

Далее ограничимся расчетом полей $\mathbf{n}(x, t)$ на интервале $0 \leq x < \infty$. Для этого используем первый столбец матричной связи (24) решений Ёоста на вещественной λ -оси. Соответствующее равенство запишем в виде, удобном для дальнейшего анализа:

$$\begin{aligned} \frac{T_{-}^{(1)}(x, \lambda)}{\lambda a(\lambda)} \exp \left(\frac{i\lambda y}{2} \right) - \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp \left(\frac{i\lambda(y-x)}{2} \right) = \\ = \frac{T_{+}^{(1)}(x, \lambda)}{\lambda} \exp \left(\frac{i\lambda y}{2} \right) - \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(\frac{i\lambda(y-x)}{2}\right) + T_+^{(2)}(x, \lambda) \frac{r(\lambda)}{\lambda} \exp\left(\frac{i\lambda y}{2}\right),$$

$$\lambda \in R, \quad (40)$$

где $r(\lambda) = b(\lambda)/a(\lambda)$, $y > x$. Как и в задаче без особенностей поля $\mathbf{S}(x, t)$ при $x = 0$, функция $T_+(x, \lambda)$ при $x > 0$ допускает представление [1, 13]

$$T_+(x, \lambda) = \exp\left(-\frac{i\lambda x \sigma_3}{2}\right) + \frac{\lambda}{2i} \int_x^\infty dy \Gamma(x, y) \exp\left(-\frac{i\lambda y \sigma_3}{2}\right). \quad (41)$$

Ядро интегрального оператора имеет вид

$$\Gamma(x, y) = \begin{pmatrix} \alpha(x, y) & \beta^*(x, y) \\ \beta(x, y) & -\alpha^*(x, y) \end{pmatrix}.$$

Зависимость от времени t подразумевается.

Распределение намагниченности в образце при $0 \leq x < \infty$, $t \geq 0$ выражается через Γ :

$$\sigma_k n_k(x, t) = [I - \Gamma(x, x, t) \sigma_3] \sigma_3 [I - \Gamma(x, x, t) \sigma_3]^\dagger. \quad (42)$$

Уравнения обратной задачи рассеяния для расчета $\Gamma(x, y)$ получаются в результате интегрирования равенства (40) по вещественной λ -оси. Интегралы по параметру λ от левой части (40) вычисляются с помощью теоремы Коши о вычетах и формул (32), (41). Интегралы в правой части равенства преобразуются с учетом представления (41). Вычисления отличаются от аналогичных для поля $\mathbf{S}(x, t)$ без особенностей [1, 13] лишь наличием дополнительных редукций на данные рассеяния и появлением у коэффициента $a(\lambda)$ особого нуля $\lambda = i|\alpha|$ при $\alpha < 0$. Последнее означает, что левая часть равенства (40) при $\lambda = i|\alpha|$ может иметь дополнительный полюс. В действительности, таковой отсутствует, так как, согласно редукции (35), $\gamma(i|\alpha) = 0$ ($\alpha^2 = \beta^2$), а значит

$$T_-^{(1)}(x, i|\alpha) \equiv 0 \quad \text{при} \quad \alpha < 0, \quad x > 0.$$

С учетом этих пояснений можно сразу написать линейное интегральное уравнение для расчета $\Gamma(x, y)$:

$$\Gamma(x, y, t) + \sigma_3 K(x + y, t) + \int_x^\infty dz \Gamma(x, z, t) \partial_y K(z + y) = 0, \quad (43)$$

где

$$K(x, t) = \begin{pmatrix} 0 & -k^*(x, t) \\ k(x, t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (44)$$

$$k(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{r(\lambda, t)}{\lambda} \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) d\lambda - \sum_{j=1}^{2N+M} \frac{m_j(t)}{\lambda_j} \exp\left(\frac{i\lambda_j x}{2}\right),$$

$$m_j(t) = \gamma_j(t)/[\partial_\lambda a(\lambda)]|_{\lambda=\lambda_j}, \quad j = 1, 2, \dots, 2N + M.$$

Рассмотренная процедура является нелинейным обобщением метода «изображений» и метода Фурье, известных в теории линейных краевых задач. Действительно, в малоамплитудном пределе при $|b(\lambda)| \ll 1$ и в отсутствие солитонов справедливы соотношения

$$a(\lambda) = \lambda + i\beta, \quad \Gamma(x, x, t) \approx -\sigma_3 K(2x, t).$$

Поэтому формула (42) для расчета спин-волнового поля сводится к преобразованию Фурье

$$n_+(x, t) = -2k(x, t) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{r(\lambda, t)}{\lambda} e^{i\lambda x} d\lambda =$$

$$= \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda b(\lambda, t=0) e^{-i\lambda^2 t} \left[\frac{e^{ix\lambda}}{\lambda + i\beta} + \frac{e^{-ix\lambda}}{\lambda - i\beta} \right],$$

$$n_3 \approx 1. \quad (45)$$

Здесь и далее $n_\pm = n_1 \pm in_2$. В формуле (45) мы учли четность функции $b(\lambda)$ (25). Прямой проверкой нетрудно убедиться, что на полуоси $0 \leq x < \infty$ при $t \geq 0$ выражение (45) является решением линеаризованного уравнения Ландау – Лифшица (2):

$$\partial_t n_+ = i \partial_x^2 n_+, \quad |n_+| \ll 1,$$

с линеаризованным краевым условием (4)

$$[\partial_x n_+ - \beta n_+]|_{x=0} = 0.$$

3. СОЛИТОНЫ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОМ ОБРАЗЦЕ

Обсудим вначале нелинейные коллективные возбуждения, которые параметризованы мнимыми нулями функции $a(\lambda)$. Оказывается, что все они отвечают неподвижным солитонам, ядра которых содержат колебательные степени свободы и локализованы около края $x = 0$ образца.

Пусть $M = 1$, $a(\lambda) = (\lambda + i\alpha)(\lambda - i\nu)/(\lambda + i\nu)$, $\nu > 0$. Из соотношения (35) найдем $|\gamma(i\nu)|^2 = \alpha^2 - \nu^2$ и запишем выражение для $m(t)$ (43) в виде

$$m(t) = \frac{2\gamma(t)\nu}{\nu + \alpha}, \quad \gamma(t) = e^{i\varphi(t)} \sqrt{\alpha^2 - \nu^2}, \quad (46)$$

$$\varphi(t) = \nu^2 t + \delta_0,$$

где δ_0 — произвольная вещественная постоянная. В отсутствие спиновых волн (при $b \equiv 0$) интегральные уравнения (43) имеют вырожденные ядра, а потому допускают точные решения. Используя (46), из (42), (43) находим односолитонное решение уравнения Ландау – Лифшица (2)

$$\begin{aligned} n_3 &= 1 - \frac{2(\alpha^2 - \nu^2)}{[\alpha \operatorname{ch}(\nu x) + \nu \operatorname{sh}(\nu x)]^2}, \\ n_+ &= -\frac{2i\gamma(t)(\alpha \operatorname{sh}(\nu x) + \nu \operatorname{ch}(\nu x))}{[\alpha \operatorname{ch}(\nu x) + \nu \operatorname{sh}(\nu x)]^2} \end{aligned} \quad (47)$$

с краевым условием (4), где $\beta = -\alpha$ в соответствии с формулой (38). Приграничный солитон (47) формируется, когда поверхностное поле превышает пороговое значение: $|\beta| > \nu$. Компоненты намагниченности в ядре солитона совершают однородную прецессию с частотой $\omega = \nu^2$ вокруг оси z . Структура ядра зависит от величины и знака параметра β (см. рис. 1).

Различия приграничных солитонов наиболее ярко проявляются вблизи порога их образования по параметру $|\beta| > \nu$. Один из них при значениях $0 < \beta - \nu \ll \beta$ представляет область полностью перемагниченного материала шириной $d \approx 2 \ln(1 + \sqrt{2})/\nu$ (рис. 1а). В центре солитона $n_3 = -1$. Координата центра $x_0 \approx (2\nu)^{-1} \ln |2\nu/(\beta - \nu)|$ хотя и не совпадает с краем образца, но из-за логарифмической зависимости от параметра $2\nu/(\beta - \nu)$ не слишком удалена от поверхности. Структуру солитона стабилизирует прецессия намагниченности в его ядре. С ростом β центр солитона прижимается к краю образца.

Второй тип солитонов образуется в поверхностном магнитном поле альтернативного направления $\beta < -\nu$. При значениях $0 < |\beta| - \nu \ll |\beta|$ солитон (47) оказывается малоамплитудным (рис. 1б). Его центр совпадает с границей образца. С увеличением $|\beta|$ усиливается перемагничивание в ядре солитона. На границе образца при $|\beta| \gg 1$ намагниченность среды выходит на насыщение: $n_3 \approx -1$.

В работе [12] для полуограниченной цепочки спинов со слабой обменной анизотропией построено приближенное решение, описывающее нелинейное возбуждение, локализованное вблизи конца цепочки. Хотя в данной работе обсуждается динамика изотропного ферромагнетика на полуоси с другими краевыми условиями, односолитонное состояние (47) по своей структуре близко к результату работы [12].

В пределе $|\beta| \rightarrow \infty$ решение (47) упрощается:

$$n_3 = 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\nu x)}, \quad n_+ = -\frac{2i e^{i\varphi(t)} \operatorname{sh}(\nu x)}{\operatorname{ch}^2(\nu x)}, \quad (48)$$

и описывает прецессирующий солитон в случае полного закрепления спинов на границе образца (рис. 1в):

$$n_3|_{x=0} = -1, \quad n_3 \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad x \rightarrow \infty.$$

Центр солитона (48) совпадает с краем образца. Толщина слоя приграничных колебаний намагниченности порядка ν^{-1} .

Все солитонные решения имеют единообразную форму записи (42):

$$\begin{aligned} n_3(x, t) &= 1 - 2|\beta(x, t)|^2, \\ n_+(x, t) &= -2[1 - \alpha^*(x, t)]\beta(x, t). \end{aligned} \quad (49)$$

Для двухсолитонного возбуждения с двумя мнимыми нулями $\lambda_{1,2} = i\nu_{1,2}$ коэффициента $a(\lambda)$ функции $m_{1,2}(t)$ имеют вид

$$\begin{aligned} m_{1,2} &= \mp 2\nu_{1,2} \left(\frac{\nu_1 + \nu_2}{\nu_2 - \nu_1} \right) \sqrt{g_{1,2}} e^{i\varphi_{1,2}(t)}, \\ g_{1,2} &= \frac{\alpha - \nu_{1,2}}{\alpha + \nu_{1,2}}, \quad \varphi_{1,2}(t) = \nu_{1,2}^2 t + \delta_{1,2}, \end{aligned} \quad (50)$$

где $\delta_{1,2}$ — вещественные параметры. Используя формулы (50), из (43) находим

$$\begin{aligned} \alpha^*(x, t) &= \frac{2}{D} \left(\frac{\nu_+}{\nu_-} \right)^2 \times \\ &\times \left[g_1 e^{x\nu_-} + g_2 e^{-x\nu_-} - \frac{2\sqrt{g_1 g_2}}{\nu_+} (\nu_1 e^{i\varphi_-(t)} + \nu_2 e^{-i\varphi_-(t)}) \right], \\ \beta(x, t) &= \frac{2i\nu_+}{D\nu_-} \left[\sqrt{g_2} e^{i\varphi_2(t)} (e^{x\nu_1} - g_1 e^{-x\nu_1}) - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{g_1} e^{i\varphi_1(t)} (e^{x\nu_2} - g_2 e^{-x\nu_2}) \right], \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} D &= e^{x\nu_+} + g_1 g_2 e^{-x\nu_+} + \\ &+ \left(\frac{\nu_+}{\nu_-} \right)^2 (g_2 e^{-x\nu_-} + g_1 e^{x\nu_-}) - \frac{8\nu_1 \nu_2}{\nu_-^2} \sqrt{g_1 g_2} \cos \varphi_-(t), \end{aligned}$$

где $\nu_{\pm} = \nu_2 \pm \nu_1$, $\varphi_-(t) = \varphi_2(t) - \varphi_1(t)$. В данном случае $M = 2$, поэтому решение (49), (51) удовлетворяет краевому условию (4) с $\beta = \alpha$. Оно описывает нелинейную суперпозицию двух прецессирующих солитонов типа (47), которые локализованы около края образца в слоях толщиной порядка ν_1^{-1} и ν_2^{-1} . В ядрах солитонов намагниченность прецессирует вокруг оси z с частотами ν_1^2 и ν_2^2 . Взаимосвязь солитонов проявляется в том, что при $x = 0$ компонента n_3 намагниченности не остается постоянной, как это было у односолитонного состояния (47). Она осциллирует с частотой $\Omega = |\nu_2^2 - \nu_1^2|$, равной разности частот прецессии индивидуальных солитонов.

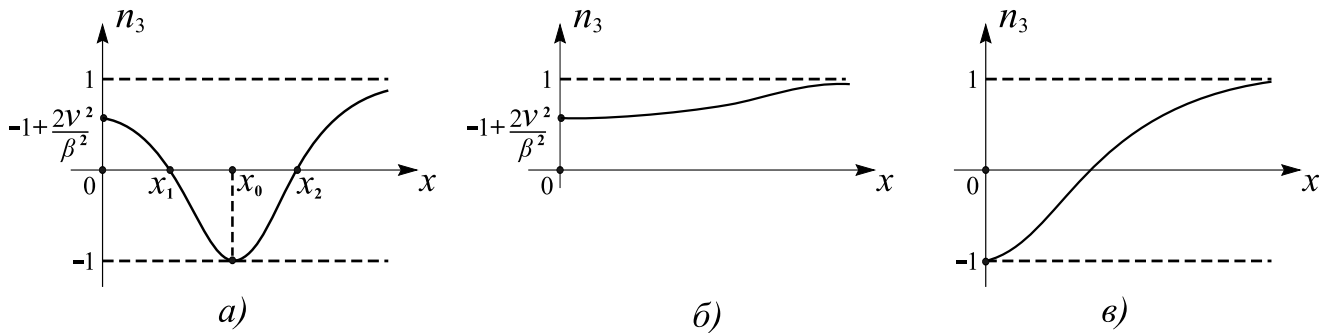


Рис. 1. Изменение компоненты n_3 вблизи края образца в зависимости от значений параметра β . При смешанном краевом условии (4): $\beta > \nu$, $2\nu x_0 = \ln[(\beta + \nu)/(\beta - \nu)]$, $x_{1,2} = x_0 + \nu^{-1} \ln(\sqrt{2} \pm 1)$ (а), $\beta < -\nu$ (б). В случае полного закрепления спинов: $n_3|_{x=0} = -1$ (в)

В одномерном случае прецессирующие солитоны как связанные состояния большого числа магновов возникают, когда амплитуда внешнего воздействия превышает определенное значение. Локализация таких солитонов около границы образца возможна только при достаточной степени неоднородности поля намагниченности вблизи поверхности образца. Поэтому для образования приграничных солитонов имеется порог по модулю поверхностной константы β . В то же время, в зависимости от знака β строения ядер приграничных солитонов, а значит и их энергии, различны. В разд. 4 вычислена полная энергия полуграниченного образца при наличии в нем солитонов и магновов (62). Энергетически выгодно, когда около границы образца локализуется при $\beta > 0$ четное, а при $\beta < 0$ нечетное число прецессирующих солитонов.

В пределе $|\alpha| \rightarrow \infty$ параметры $g_{1,2}$ равны единице. Двухсолитонное решение (49), (51) упрощается и описывает приграничные колебания намагниченности при полном закреплении поверхностных спинов в соответствии с краевым условием

$$n_3|_{x=0} = 1,$$

которое знаком правой части отличается от граничного условия для односолитонного состояния. Таким образом, в зависимости от выбора одного из вариантов полного закрепления поверхностных спинов (7) граница образца захватывает либо четное, либо нечетное число M прецессирующих солитонов:

$$n_3|_{x=0} = (-1)^M. \quad (52)$$

Второй класс солитонов параметризуют пары комплексных нулей (31) функции $a(\lambda)$. Это движущиеся объекты, для которых характерны упругие парные столкновения друг с другом и отражения от края образца.

Обсудим простейший солитон, который соответствует нулям $\lambda = \lambda_0, -\lambda_0^*$ функции $a(\lambda)$:

$$a(\lambda) = (\lambda + i\alpha) \frac{(\lambda - \lambda_0)(\lambda + \lambda_0^*)}{(\lambda + \lambda_0)(\lambda - \lambda_0^*)}.$$

Тогда в уравнении обратной задачи рассеяния имеем

$$m_1(t) = 2\lambda_0 \kappa(t) \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right),$$

$$m_2(t) = \frac{2\lambda_0^* g^*}{\kappa^*(t)} \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right),$$

$$\kappa(t) = \frac{\gamma(t)}{\lambda_0 + i\alpha} = \kappa(t=0) e^{-i\lambda_0^2 t}, \quad g = \frac{i\alpha - \lambda_0}{i\alpha + \lambda_0}.$$

Распределение намагниченности в образцы дают формулы (49), где

$$\begin{aligned} \alpha^*(x, x, t) = & \frac{2}{\Delta} \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right) \times \\ & \times \left[\left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right) \left(g e^{ix(\lambda_0 + \lambda_0^*)} + g^* e^{-ix(\lambda_0 + \lambda_0^*)} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{2}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \left(\lambda_0^* |\kappa(t)|^2 - \lambda_0 \left| \frac{g}{\kappa(t)} \right|^2 \right) \right], \quad (53) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta(x, x, t) = & -\frac{2}{\Delta} \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right) \times \\ & \times \left[\kappa(t) \left(e^{i\lambda_0^* x} - g^* e^{-i\lambda_0^* x} \right) - \frac{g^*}{\kappa^*(t)} \left(e^{-i\lambda_0 x} - g e^{i\lambda_0 x} \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta = & \left(\frac{2|\lambda_0|}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right)^2 \left(|\kappa(t)|^2 + \left| \frac{g}{\kappa(t)} \right|^2 \right) + \\ & + |g|^2 e^{ix(\lambda_0 - \lambda_0^*)} + e^{-ix(\lambda_0 - \lambda_0^*)} + \\ & + \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right)^2 \left(g e^{ix(\lambda_0 + \lambda_0^*)} + g^* e^{-ix(\lambda_0 + \lambda_0^*)} \right). \end{aligned}$$

В этом случае $M = 0$, поэтому решение (49), (53) удовлетворяет краевому условию (4) с $\beta = \alpha$. Оно описывает движение частицеподобного возбуждения из внутренней части образца к его краю, отражение от границы и последующее возвращение локализованного объекта в глубь образца. В ходе столкновения с поверхностью образца ядро магнитного возбуждения сильно деформируется. Однако после удаления от края образца оно принимает стационарную форму.

Проанализируем особенности отражения солитона от поверхности образца. Для этого выделим из параметра λ_0 его вещественную и мнимую части: $2\lambda_0 = v + iu$. Поскольку $\text{Im } \lambda_0 > 0$, значения u всегда положительны. Примем для определенности, что параметр v тоже положителен. Выражение для поля $\alpha^*(x, t)$ ($\beta(x, t)$) (53) имеет вид дроби. Ее асимптотическое поведение при $x \gg 1$ определяется конкуренцией слагаемых в числителе с экспоненциальными множителями: $e^{\pm u x}$, $e^{\pm u v t/2}$ ($e^{\pm(x+vt)u/2}$, $e^{\pm(x-vt)u/2}$) и ведущих членов в знаменателе с коэффициентами: $e^{\pm u x}$, $e^{\pm u v t/2}$. Отсюда сразу следует, что при $t \rightarrow \pm\infty$ в системах отсчета, связанных с солитоном, где $x \mp vt = \text{const}$, его структура описывается выражениями

$$\begin{aligned} n_3 &= 1 - \frac{2u^2}{(u^2 + v^2) \text{ch}^2 \Phi_{\pm}}, \quad 2\Phi_{\pm} = u(x \mp vt - x_{\pm}), \\ n_{\pm} &= \pm \frac{2iu\kappa(t=0)}{(u^2 + v^2)|\kappa(t=0)|} \times \\ &\times \exp\left(i\left[\frac{(u^2 - v^2)t}{4} \pm \frac{vx}{2} + \varphi_{\pm}\right]\right) \frac{v \text{ch } \Phi_{\pm} \pm iu \text{sh } \Phi_{\pm}}{\text{ch}^2 \Phi_{\pm}}, \end{aligned} \quad (54)$$

где

$$\begin{aligned} x_{+} &= 2u^{-1} \ln(2|\lambda_0 \kappa(0)/v|), \\ x_{-} &= 2u^{-1} \ln[2|g\lambda_0|/(v|\kappa(0)|)], \\ \varphi_{+} &= -\arg \lambda_0, \quad \varphi_{-} = \arg \lambda_0 - \arg g. \end{aligned}$$

Формулы (54) описывают солитоны безграничного гейзенберговского ферромагнетика с характерным размером порядка u^{-1} , движущиеся внутри образца со скоростями $\pm v$. На больших расстояниях от поверхности единственным результатом отражения от нее солитона оказывается изменение фазы внутренней прецессии и сдвиг центра солитона. В системах отсчета, сопутствующих солитону, намагниченность прецессирует с частотой $\Omega = (u^2 + v^2)/4$ вокруг оси z . Изменение начальной фазы прецессии солитона

$$\varphi_{+} - \varphi_{-} = -i \ln \left[\frac{\lambda_0^*}{\lambda_0} \left(\frac{i\alpha - \lambda_0}{i\alpha + \lambda_0} \right) \right]$$

после его отражения несет информацию о характере закрепления спинов на поверхности образца. Это обстоятельство можно использовать для диагностики состояния поверхностных спинов.

При $v = 0$ выражению (54) соответствует покоящийся солитон на большом удалении от границы образца. В этом случае формула (54) совпадает с решением, полученным для неподвижного солитона в безграничном изотропном ферромагнетике [1, 13].

Напомним, что приграничные солитоны образуются только при условии, что величины поверхностного поля $|\beta|$ больше определенного порогового значения. Для движущихся солитонов такого ограничения нет. Решение (49), (53) справедливо для любых значений поверхностного поля β .

При $\alpha = \beta = 0$ параметр $g = -1$ и формулы (49), (53) дают решение модели Ландау–Лифшица (2) со свободными спинами на границе образца:

$$[\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n}]|_{x=0} = 0.$$

В этом случае движение и отражение солитона сопровождается изменением во времени компоненты n_3 намагниченности на границе образца по закону

$$n_3(x=0, t) = 1 - 2 \left(\frac{2uv}{u^2 + v^2} \right)^2 \text{ch}^{-2} \left(\frac{uvt}{2} + \ln \kappa(0) \right).$$

В пределе $\alpha \rightarrow \infty$ параметр $g = 1$ и решение (49), (53) описывает отражение прецессирующего солитона от границы образца с закрепленными на ней спинами: $n_3|_{x=0} = 1$.

4. ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ

Как и в неограниченной среде, не зависящий от времени элемент $a(\lambda)$ матрицы перехода $T(\lambda)$ является производящим функционалом интегралов движения полубесконечного ферромагнетика. С помощью формул (14), (19), (24) получим выражение для $T(\lambda)$:

$$T(\lambda) = T_{+}^{-1}(+0, \lambda) K(\lambda) T_{-}(-0, \lambda), \quad (55)$$

которое будет основой дальнейшего анализа. При $x > 0$ матрица $T_{+}(x, \lambda)$ унимодулярна, поэтому

$$T_{+}^{-1}(x, \lambda) = \sigma_2 T^T(x, \lambda) \sigma_2.$$

Верхний индекс « T » означает транспонирование. Свойство симметрии (33) позволяет выразить $T_{-}(-0, \lambda)$ через $T_{+}^{*}(+0, \lambda^{*})$:

$$T_{-}(-0, \lambda) = \sigma_2 T_{+}^{*}(+0, -\lambda^{*}) \sigma_2.$$

В результате (55) примет вид

$$T(\lambda) = \sigma_2 T_+^T(+0, \lambda) \sigma_2 K(\lambda) \sigma_2 T_+^*(+0, -\lambda^*) \sigma_2. \quad (56)$$

Отсюда получаем выражение для $a(\lambda)$:

$$a(\lambda) = (\lambda + i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{22}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{22}^* + (\lambda - i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{12}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{12}^*. \quad (57)$$

Серию локальных интегралов движения порождает разложение функции $a(\lambda)$ по степеням λ^{-1} . Для его получения необходимо найти соответствующие ряды для элементов матрицы $T_+(+0, \lambda)$. Матричная функция $T_+(+0, \lambda)$ имеет следующую алгебраическую структуру:

$$T_+(+0, \lambda) = (I + W(0, \lambda)) e^{Z(+0, y \rightarrow +\infty)}. \quad (58)$$

Разложение по обратным степеням λ^{-1} антидиагональной матрицы $W(x, \lambda)$ при $x \geq 0$ получено в [13]:

$$W(x, \lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{W_n(x)}{\lambda^n}, \quad (59)$$

$$W_n(x) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_n^*(x) \\ \omega_n(x) & 0 \end{pmatrix},$$

где $w_0(x) = n_+(x)/[1 + n_3(x)]$. Следующие коэффициенты определяются рекуррентными соотношениями:

$$\omega_{n+1}(x) = -i \partial_x \omega_n(x) - \frac{n_-(x)}{2} \sum_{k=1}^n \omega_n(x) \omega_{n-k+1}(x),$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

При $n = 0$ последняя сумма отсутствует.

Диагональная матрица $Z(+0, y \rightarrow +\infty)$ выражается через $W_n(x)$:

$$Z(+0, y \rightarrow +\infty) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Z_n}{\lambda^n}, \quad Z_n = \begin{pmatrix} \xi_n & 0 \\ 0 & \xi_n^* \end{pmatrix}, \quad (60)$$

$$Z_n = \frac{i}{2} \int_0^{\infty} [n_1(x) \sigma_1 + n_2(x) \sigma_2] W_{n+1}(x) dx.$$

Используя эти результаты, вычислим первый член асимптотического разложения функции

$$\ln \frac{a(\lambda)}{\sqrt{\lambda^2 + \beta^2}} = -\frac{iH}{\lambda} + \left(\frac{1}{\lambda^2} \right). \quad (61)$$

Выражение для H :

$$H = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx (\partial_x \mathbf{n})^2 - \beta n_3(x=0),$$

совпадает с энергией (1) полубесконечного ферромагнетика. С другой стороны, разложение по степеням λ^{-1} левой части равенства (61) можно получить сразу, так как функция $a(\lambda)$ нам известна (37). Сравнение двух разложений дает явные формулы для локальных интегралов движения полубесконечного ферромагнетика. В частности, в терминах спектральных данных энергия образца «диагонализуются» и совпадает с энергией идеального газа солитонов и магнонов:

$$H = (-1)^{M+1} \beta + 2 \sum_{s=1}^M \nu_s + 4 \sum_{k=1}^N \text{Im } \lambda_k + \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^2 \rho(\mu),$$

$$\rho(\mu) = -\frac{1}{2\pi\mu^2} \ln \left(1 - \frac{|b(\mu)|^2}{\mu^2 + \beta^2} \right) > 0. \quad (62)$$

Величина $\rho(\mu)$ имеет смысл плотности спин-волновых мод с волновым числом μ . Дискретные слагаемые соответствуют аддитивным вкладам в энергию системы от разных типов солитонов.

Непосредственно из уравнения Ландау – Лифшица (2) следует, что при краевых условиях (3), (4) существует еще один важный интеграл движения:

$$N = \int_0^{\infty} (1 - n_3(x)) dx. \quad (63)$$

Он определяет число спиновых отклонений в системе [14, 15].

Покажем, что как и в безграничной среде [1, 13], N выражается через значение $\partial_\lambda a(\lambda)|_{\lambda=0}$. С помощью (14), (19) находим

$$T_+(x, \lambda=0) = I, \quad x > 0. \quad (64)$$

Воспользуемся интегральным уравнением для функции Ёюста $T_+(x, \lambda)$ в области $x > 0$:

$$T_+(x, \lambda) = \exp \left(\frac{\lambda x \sigma_3}{2i} \right) + \frac{i\lambda}{2} \int_x^{+\infty} dx' \exp \left(\frac{\lambda(x-x')\sigma_3}{2i} \right) \times$$

$$\times [n_k(x')\sigma_k - \sigma_3] T_+(x', \lambda).$$

Из него с учетом (64) следует соотношение

$$\partial_\lambda T_+(x, \lambda)|_{\lambda=0} = \frac{i}{2} \int_0^{+\infty} dx' [n_k(x')\sigma_k - \sigma_3]. \quad (65)$$

С помощью (64), (65), из представления (57) получим

$$\partial_\lambda a(\lambda)|_{\lambda=0} = 1 - \beta N.$$

Учтем связь $\alpha = (-1)^M \beta$ и с помощью дисперсионного соотношения (37) выразим число спиновых отклонений через параметры солитонов и плотность магнов в образце:

$$N = \sum_{s=1}^M \frac{2}{\nu_s} + 4 \sum_{k=1}^N \frac{\text{Im } \lambda_k}{|\lambda_k|^2} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \rho(\mu) + \beta^{-1} [1 - (-1)^M]. \quad (66)$$

Хорошо известно [16], что далекие фурье-компоненты полей без особенностей на вещественной оси экспоненциально малы. Поскольку метод обратной задачи рассеяния является нелинейным аналогом преобразования Фурье, спектральные функции $b(\lambda)$ полей $\mathbf{S}(x, t)$ без особенностей также убывают быстрее любой степени λ при $\lambda \rightarrow \infty$. В рассматриваемой задаче мы продолжили поля $\mathbf{n}(x, t)$, заданные на полуоси $0 \leq x < \infty$, на всю ось $-\infty < x < \infty$. Производные продолжения имеют скачки на вещественной оси. В таких случаях далекие фурье-компоненты линейных мод имеют степенную малость при $\lambda \rightarrow \infty$. Покажем, что в нелинейной начально-краевой задаче (2)–(5) спектральная плотность $b(\lambda)$ также характеризуется степенным разложением при $\lambda \rightarrow \infty$. Для солитонных состояний все коэффициенты степенного ряда должны обращаться в нуль. Поэтому для полубезграничного ферромагнетика $b(\lambda)$ оказывается производящей функцией нетривиальных сохраняющихся со временем связей между полями $\mathbf{n}(x, t)$ и их пространственными производными на границе образца.

Подходящее представление для $b(\lambda)$ получим из (56). Вычисления упрощаются, если с помощью формул (22)

$$\begin{aligned} [T_+(+0, \lambda)]_{11} &= [T_+^*(+0, \lambda^*)]_{22}, \\ [T_+(+0, \lambda)]_{21} &= -[T_+^*(+0, \lambda^*)]_{12} \end{aligned}$$

выразить коэффициент $b(\lambda)$ через те же функции, что были использованы в формуле (57) для $a(\lambda)$:

$$b(\lambda) = (\lambda + i\beta) [T_+^*(+0, \lambda^*)]_{12} [T_+^*(+0, -\lambda^*)]_{22} - (\lambda - i\beta) [T_+^*(+0, \lambda^*)]_{22} [T_+^*(+0, -\lambda^*)]_{12}. \quad (67)$$

Используя соотношения (58)–(60), из (67) находим асимптотическое разложение при $\lambda \gg 1$ для функции $b(\lambda)$:

$$b(\lambda) = -2 \exp \left(2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi_{2k}}{\lambda^{2k}} \right) \times \sum_{p=0}^{\infty} (i\beta \omega_{2p} + \omega_{2p+1})|_{x=0} \lambda^{-2p}. \quad (68)$$

Для чисто солитонных состояний $b(\lambda) \equiv 0$, поэтому все предэкспоненциальные множители в (68) обращаются в нуль:

$$(i\beta \omega_{2p} + \omega_{2p+1})|_{x=0} = 0, \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

Мы получили дополнительный набор законов сохранения, которые управляют выполнением солитонами верных краевых условий (3), (4). Первый из них имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \left[\frac{n_+(x, t)}{1 + n_3(x, t)} \right] \Big|_{x=0} = \beta, \quad \beta = (-1)^M \alpha. \quad (69)$$

Для одиночного приграничного солитона (47) в справедливости тождества (69) легко убедиться простой проверкой.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом обратной задачи рассеяния исследована нелинейная динамика солитонов и спиновых волн в полубесконечном изотропном ферромагнетике. Учтены смешанные краевые условия, предельным случаем которых являются свободные поверхностные спины и спины с полным закреплением на границе образца. Предсказаны и подробно исследованы новые типы солитонов, характерные для образцов конечных размеров. Показано, что в ферромагнетике пороговым образом по параметру закрепления спинов могут зарождаться околограничные солитоны с характерными частотными и модуляционными свойствами. Кроме того, при любой степени закрепления поверхностных спинов существуют движущиеся солитоны, которые упруго отражаются от границы образца. В ходе отражения ядра солитонов сильно деформируются, поэтому такие солитоны невозможно описать известными ранее пертурбативными методами. В то же время, на больших расстояниях от границы ядра солитонов принимают форму типичных прецессирующих солитонов безграничного ферромагнетика. Сдвиг фазы, приобретаемый солитонами после отражения от границы образца, можно использовать для диагностики степени закрепления поверхностных спинов. Полученные результаты допускают экспериментальную проверку. Они полезны для моделирования солитонных возбуждений в реальных образцах конечных размеров.

В работе найдено разделение переменных, после которого все интегралы движения полубесконечного ферромагнетика записываются в виде суммы вкладов от разных типов солитонов и квазичастиц спектра спиновых волн. Получены новые законы сохранения, которые обеспечивают локализацию магнитных солитонов около поверхности образца или их отражение от таковой.

Финансирование. Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки России (тема «Квант», № АААА-А18-118020190095-4).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Б. Борисов, В. В. Киселев, *Квазиодномерные магнитные солитоны*, Физматлит, Москва (2014).
2. Г. В. Дрейден, А. В. Порубов, А. М. Самсонов, И. В. Семенова, ЖТФ **71**, 1 (2001).
3. В. В. Киселев, А. А. Расковалов, ЖЭТФ **62**, 693 (2022).
4. I. T. Habibullin, in Nonlinear World: IV Int. Workshop on Nonlinear and Turbulent Processes in Physics, ed. by V. G. Baryachtar et. al., World Scientific Singapore (1989), Vol. 1, p. 130.
5. И. Т. Хабибуллин, ТМФ **86**, 43 (1991).
6. A. S. Fokas, Commun. Math. Phys. **230**, 1 (2002).
7. A. S. Fokas, Comm. Pure Appl. Math., **V. LVIII**, 639 (2005).
8. П. Н. Бибииков, В. О. Тарасов, ТМФ **79**, 334 (1989).
9. V. O. Tarasov, Inverse Problems **7**, 435 (1991).
10. A. S. Fokas, Physica D **35**, 167 (1989).
11. Е. К. Склянин, Функциональный анализ и его приложения **21**, 86 (1987).
12. Н. Г. Гочев, ФНТ **10**, 615 (1984).
13. Л. Д. Фаддеев, Л. А. Тахтаджян, *Гамильтонов подход в теории солитонов*, Наука, Москва (1986).
14. А. М. Косевич, Е. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
15. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, Phys. Rep. **194**, 117 (1990).
16. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1979).

О ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВАХ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ РЭЛЕЯ

Б. Я. Балагуров*

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 ноября 2022 г.,
после переработки 13 ноября 2022 г.
Принята к публикации 20 ноября 2022 г.

Рассмотрены гальваномагнитные свойства двумерной модели Рэлея — изотропной матрицы с двоякопериодическим расположением включений круговой формы — с фазовым переходом металл — диэлектрик. Для соответствующего тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ получено выражение, справедливое во всей предпороговой (вплоть до соприкосновения кругов) критической области — окрестности точки перехода. Выяснено поведение составляющих тензора $\hat{\sigma}_e$ в слабом и сильном магнитных полях.

DOI: 10.31857/S0044451023030100

EDN: QEQFON

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение гальваномагнитных свойств проводящих материалов представляет общефизический интерес и позволяет определить как их электронную структуру, так и индивидуальные характеристики носителей заряда — подвижность и эффективную массу. Возможность извлечения подобной информации из экспериментальных данных основана на подробно разработанной микроскопической теории гальваномагнитных явлений в однородных проводниках [1]. Аналогичные исследования проводимости в присутствии магнитного поля проводятся и для композиционных материалов. При этом гальваномагнитные характеристики компонент считаются заданными, так как могут определяться на соответствующих однородных образцах. В данном случае представляет интерес влияние на гальваномагнитные характеристики композита в целом соотношения между свойствами компонент, концентрации и пространственного распределения, т. е. структуры композита. При этом особый интерес представляет изучение этих явлений в композитах с фазовым переходом металл — диэлектрик, что дает возможность получать дополнительную информацию и о самом фазовом превращении.

Для бинарных композитов с фазовым переходом металл — диэлектрик такие величины, как коэффициент Холла и магнитосопротивление, получили достаточно подробное теоретическое описание [2, 3] в случае малой напряженности магнитного поля $\mathbf{H}$. В то же время теоретическое изучение гальваномагнитных характеристик неоднородных сред при произвольном $\mathbf{H}$ наталкивается на серьезные трудности.

Определенный прогресс в решении этой проблемы достигнут для двумерных моделей композитов. Так, в работе [4] с помощью преобразования симметрии вычислены составляющие тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ двумерной бинарной системы со случайным распределением компонент с половинным составом. Из результатов этой работы следует, что для рассмотренной в ней модели омическая составляющая σ_{xe} тензора $\hat{\sigma}_e$ при $H \rightarrow \infty$ ведет себя аномальным образом: $\sigma_{xe} \propto 1/H$ вместо обычного $\sigma_x \propto 1/H^2$.

Обсуждаемая задача для двумерного бинарного композита получила точное решение в работе [5], где составляющие тензора $\hat{\sigma}_e$ произвольной подобной системы выражены через гальваномагнитные характеристики отдельных компонент и безразмерную эффективную проводимость этой модели при $H = 0$. Использование представлений гипотезы подобия [6] позволило рассмотреть [5] поведение эффективных гальваномагнитных характеристик двумерного случайно-неоднородного композита с фазовым переходом металл — диэлектрик во всей кри-

* E-mail: byabalagurov@mail.ru

тической области — окрестности точки перехода. В результате оказалось, что при концентрации, отличной от критической, аномальная проводимость $\sigma_{xe} \propto 1/H$ существует в конечном интервале магнитных полей. Для применения общих формул работы [5] к моделям другой структуры (например, регулярной) достаточно знать эффективную проводимость σ_e этой системы в отсутствие магнитного поля.

Вычисление эффективной проводимости σ_e композитов является крайне сложной задачей даже при $H = 0$. Точные аналитические выражения для σ_e известны только для некоторых двумерных моделей. Для упомянутой выше бинарной случайно-неоднородной системы величина σ_e определена только при фиксированной (критической) концентрации [7]. В то же время для двумерной модели Рэля эффективная проводимость σ_e вычислена для всей критической предпороговой области [8].

В настоящей работе рассмотрены гальваномагнитные свойства двумерной модели Рэля в области фазового перехода металл–диэлектрик. Использование общих формул из [5] и выражения для безразмерной эффективной проводимости при $H = 0$ из [8] позволило определить гальваномагнитные характеристики этой модели во всей предпороговой критической области и при произвольных магнитных полях. Оказалось, в частности, что при критической концентрации (пороге протекания) омическая составляющая тензора $\hat{\sigma}_e$ в пределе $H \rightarrow \infty$ меняется следующим образом: $\sigma_{xe} \propto H^{-2} \ln H$, вместо обычного закона $\sigma_x \propto 1/H^2$.

2. ПРОВОДИМОСТЬ МОДЕЛИ ПРИ $H = 0$

Согласно работе [5], для определения гальваномагнитных характеристик двумерной модели Рэля необходимо знать ее эффективную проводимость σ_e в отсутствие магнитного поля. Обсуждаемая модель представляет собой изотропную матрицу проводимости σ_1 с системой круговых включений радиуса r_0 и проводимости σ_2 . Центры кругов расположены в узлах квадратной решетки периода $2a$. Эффективная проводимость σ_e такой модели является функцией трех основных аргументов: $\sigma_e = \sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2)$, где $p = (4a^2 - \pi r_0^2)/(2a)^2$ — безразмерная концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты, т.е. матрицы. В дальнейшем будет использоваться безразмерная эффективная проводимость $f(p, h)$, вводимая согласно

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 f(p, h), \quad h = \sigma_2/\sigma_1 \quad (1)$$

и являющаяся функцией двух аргументов. При $h \rightarrow 0$ и $p \rightarrow p_c$, где

$$p_c = 1 - \frac{\pi}{4} \quad (2)$$

— критическая концентрация (порог протекания), величина f стремится к нулю, так что в рассматриваемой модели происходит фазовый переход металл–диэлектрик.

В окрестности точки этого перехода безразмерная эффективная проводимость имеет вид [8]

$$f(p, h) = \frac{1}{\pi} \left\{ \xi_0 + 2h \left[\ln \frac{1}{\xi_0} - g(\gamma) \right] \right\}, \quad \gamma = \frac{h}{\xi_0}, \quad (3)$$

$$g(\gamma) = -\gamma \int_0^\infty e^{-\gamma x} \ln(1 - e^{-x}) dx. \quad (4)$$

Здесь

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{a^2 - r_0^2}}{a}, \quad \xi_0^2 = \frac{4p_c}{\pi} \tau, \quad (5)$$

где

$$\tau = \frac{p - p_c}{p_c} \quad (6)$$

— параметр близости к точке перехода по концентрации.

Выражения (3), (4) для проводимости $f(p, h)$ справедливы в предпороговой ($a \geq r_0$, $\tau \geq 0$) критической ($\xi_0 \ll 1$, $h \ll 1$) области. Для функции $g(\gamma)$ имеем разложения

$$\gamma \ll 1: \quad g(\gamma) = \frac{\pi^2}{6} \gamma - \zeta(3) \gamma^2 + \frac{\pi^4}{90} \gamma^3 + \dots, \quad (7)$$

$$\gamma \gg 1: \quad g(\gamma) = \ln \gamma + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{12} \frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{120} \frac{1}{\gamma^4} + \dots \quad (8)$$

Здесь

$$\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = 1.202 \dots \quad (9)$$

и $\mathbb{C} = 0.577 \dots$ — постоянная Эйлера. Для проводимости $f(p, h)$ в двух предельных случаях имеем соответственно

$$h \ll \xi_0 \ll 1:$$

$$f(p, h) = \xi_0 \left\{ \frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \frac{h}{\xi_0} \ln \frac{1}{\xi_0} - \frac{\pi}{3} \left(\frac{h}{\xi_0} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \zeta(3) \left(\frac{h}{\xi_0} \right)^3 + \dots \right\}, \quad (10)$$

$\xi_0 \ll h \ll 1$:

$$f(p, h) = h \left\{ \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} \right) + \frac{1}{6\pi} \left(\frac{\xi_0}{h} \right)^2 - \frac{1}{60\pi} \left(\frac{\xi_0}{h} \right)^4 + \dots \right\}. \quad (11)$$

3. СЛАБЫЕ МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ

Предположим, что двумерная модель Рэля занимает плоскость xy , так что вектор напряженности поперечного магнитного поля $\mathbf{H}$ направлен вдоль оси z . В этом случае проводимость компонент описывается тензорами $\hat{\sigma}_1$ и $\hat{\sigma}_2$, где

$$\hat{\sigma}_i = \begin{pmatrix} \sigma_{xi} & \sigma_{ai} \\ -\sigma_{ai} & \sigma_{xi} \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2 \quad (12)$$

Здесь σ_{xi} — омическая, а σ_{ai} — холловская составляющие тензора проводимости $\hat{\sigma}_i$. В слабом магнитном поле напряженности H холловские составляющие линейны по H ($\sigma_{ai} \propto H$), а для омических составляющих имеем

$$\sigma_{xi} \simeq \sigma_i + \delta\sigma_{xi}, \quad \delta\sigma_{xi} \propto H^2. \quad (13)$$

Здесь σ_i — проводимость i -й компоненты при $H = 0$. Тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ имеет вид, аналогичный (12):

$$\hat{\sigma}_e = \begin{pmatrix} \sigma_{xe} & \sigma_{ae} \\ -\sigma_{ae} & \sigma_{xe} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Холловская составляющая σ_{ae} тензора $\hat{\sigma}_e$ также линейна по H и имеет следующий вид [5, 9]:

$$\sigma_{ae} = \sigma_{a2} + (\sigma_{a1} - \sigma_{a2}) \varphi_a(p, h). \quad (15)$$

В двумерном случае функция $\varphi_a(p, h)$ может быть выражена через безразмерную эффективную проводимость $f(p, h)$:

$$\varphi_a = \frac{f^2 - h^2}{1 - h^2}. \quad (16)$$

В линейном по H приближении основной исследуемой характеристикой является коэффициент Холла R , определяемый следующим образом $R = H^{-1} \sigma_a / \sigma^2$. Здесь σ — проводимость в отсутствие магнитного поля. Для эффективного коэффициента Холла R_e из (15) и (16) находим

$$R_e = \frac{1}{H} \frac{\sigma_{ae}}{\sigma_e^2} = h^2 \frac{R_2}{f^2} + (R_1 - h^2 R_2) \mathbb{R}, \quad (17)$$

$$\mathbb{R}(p, h) = \frac{\varphi_a(p, h)}{[f(p, h)]^2} = \frac{1}{1 - h^2} \left(1 - \frac{h^2}{f^2} \right). \quad (18)$$

В формуле (17) R_1 и R_2 — коэффициенты Холла для первой и второй компонент.

Таким образом, в двумерном случае эффективный коэффициент Холла R_e полностью определяется величиной $f(p, h)$ и для рассматриваемой модели Рэля может быть вычислен с помощью выражений (3), (4) в любой точке предпороговой критической области. В двух предельных случаях (10), (11) получаем

$$h \ll \xi_0: \quad \mathbb{R} \simeq 1 - \pi^2 \frac{h^2}{\xi_0^2}, \quad (19)$$

$$h \gg \xi_0: \quad \mathbb{R} \simeq 1 - \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{[\ln(b/h)]^2}, \quad (20)$$

где $\ln b = -\mathbb{C}$ и учтено, что $h \ll 1$. Согласно (19) и (20), в обоих предельных случаях величина $\mathbb{R}$ не превосходит единицы.

В квадратичном по H приближении аналогично (13) имеем

$$\sigma_{xe} = \sigma_e + \delta\sigma_{xe}, \quad \delta\sigma_{xe} \propto H^2, \quad (21)$$

где σ_e — эффективная проводимость при $H = 0$. Согласно [5, 9],

$$\delta\sigma_{xe} = \psi_1 \delta\sigma_{x1} + \psi_2 \delta\sigma_{x2} + \frac{(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})^2}{\sigma_1} \chi. \quad (22)$$

В формуле (22) функции $\psi_1 = \psi_1(p, h)$, $\psi_2 = \psi_2(p, h)$ и $\chi = \chi(p, h)$ в рассматриваемом двумерном случае выражаются через проводимость $f(p, h)$:

$$\psi_1 = f - hf', \quad \psi_2 = f'; \quad f' = \frac{\partial f(p, h)}{\partial h}, \quad (23)$$

$$\chi = \frac{f - hf' - f\varphi_a}{1 - h^2} \quad (24)$$

с φ_a из формулы (16). В двух предельных случаях (10), (11) получаем

$h \ll \xi_0 \ll 1$:

$$\psi_1 \simeq \frac{1}{\pi} \xi_0, \quad \psi_2 \simeq \frac{2}{\pi} \ln \frac{1}{\xi_0}, \quad \chi \simeq \frac{1}{\pi} \xi_0, \quad (25)$$

$\xi_0 \ll h \ll 1$:

$$\psi_1 \simeq \frac{2}{\pi} h, \quad \psi_2 \simeq \frac{2}{\pi} \ln \frac{d}{h}, \quad \chi \simeq \frac{2}{\pi} h, \quad (26)$$

где $\ln d = -\mathbb{C} - 1$.

Для тензора удельного сопротивления $\hat{\rho}$ имеем

$$\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \rho_x & \rho_a \\ -\rho_a & \rho_x \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$$\rho_x = \frac{\sigma_x}{\sigma_x^2 + \sigma_a^2}, \quad \rho_a = -\frac{\sigma_a}{\sigma_x^2 + \sigma_a^2}. \quad (28)$$

Поэтому для магнитосопротивления получаем

$$\frac{\rho_{xe}(H) - \rho_{xe}(0)}{\rho_{xe}(0)} = - \left(\frac{\delta\sigma_{xe}}{\sigma_e} + \frac{\sigma_{ae}^2}{\sigma_e^2} \right). \quad (29)$$

4. СИЛЬНЫЕ МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ

Задача о гальваномагнитных свойствах двумерного композита имеет решение для произвольной двухкомпонентной изотропной модели [5]. Согласно [5] (см. также [9]), для составляющих σ_{xe} и σ_{ae} тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ имеют место следующие выражения:

$$\sigma_{xe} = \frac{\sigma_{x1}\sigma_{x2}(1-\lambda^2)f}{\lambda(1-f^2)\sigma_{x1} + (f^2-\lambda^2)\sigma_{x2}}, \quad (30)$$

$$\sigma_{ae} = \frac{\sigma_{a2}\lambda(1-f^2)\sigma_{x1} + \sigma_{a1}(f^2-\lambda^2)\sigma_{x2}}{\lambda(1-f^2)\sigma_{x1} + (f^2-\lambda^2)\sigma_{x2}}. \quad (31)$$

Здесь

$$\lambda = \frac{1}{4\sigma_{x1}\sigma_{x2}} \left\{ [(\sigma_{x1} + \sigma_{x2})^2 + (\sigma_{a1} - \sigma_{a2})^2]^{1/2} - [(\sigma_{x1} - \sigma_{x2})^2 + (\sigma_{a1} - \sigma_{a2})^2]^{1/2} \right\}^2 \quad (32)$$

и $f = f(p, \lambda)$ — безразмерная эффективная проводимость рассматриваемой модели $f(p, h)$ с заменой аргумента h на λ . Отметим, что для бинарной случайно-неоднородной двумерной системы с половинным составом имеем $f(1/2, \lambda) = \sqrt{\lambda}$ [7], так что из (30), (31) с учетом (32) для σ_{xe} и σ_{ae} следуют выражения (см. [5]), несколько обобщающие соответствующие результаты работы [4].

Будем считать, что для обсуждаемого бинарного композита с фазовым переходом металл — диэлектрик неравенства $\sigma_{x2} \ll \sigma_{x1}$ и $\sigma_{a2} \ll \sigma_{a1}$ выполняются при любой напряженности магнитного поля H . В этом случае для величины λ из (32) имеем

$$\lambda \simeq \frac{\sigma_{x1}\sigma_{x2}}{\sigma_{x1}^2 + \sigma_{a1}^2} \ll 1. \quad (33)$$

Далее для проводимостей σ_{xi} и σ_{ai} будем использовать модельные формулы из [1]

$$\sigma_{xi} = \frac{\sigma_i}{1 + \beta_i^2}, \quad \sigma_{ai} = \frac{\sigma_i\beta_i}{1 + \beta_i^2}. \quad (34)$$

Здесь σ_i — проводимость i -й компоненты при $H = 0$ и $\beta_i \propto H$ — холловский параметр. Положив, как и в [4], $\beta_1 = \beta_2 = \beta$, из (33) с учетом (34) получим

$$\lambda = \frac{h}{1 + \beta^2} \ll 1, \quad (35)$$

где, как обычно, $h = \sigma_2/\sigma_1$. Поэтому $\lambda \simeq h \ll 1$ при $\beta \ll 1$ и $\lambda \simeq h/\beta^2 \ll h$ при $\beta \gg 1$.

Если система находится достаточно «далеко» от порога протекания (критической концентрации), так что $\xi_0 \gg \lambda$, то

$$f(p, \lambda) \simeq f_d = \frac{1}{\pi}\xi_0, \quad (36)$$

где $f_d = f(p, 0)$. В этом случае из общих формул (30) и (31) с учетом (35) и (36) следует

$$\beta \ll 1: \quad \sigma_{xe} = \sigma_1 f_d, \quad \sigma_{ae} = \sigma_{a2} + \sigma_{a1} f_d^2, \quad (37)$$

$\beta \gg 1:$

$$\sigma_{xe} = \frac{\sigma_1 f_d}{1 + \beta^2 f_d^2}, \quad \sigma_{ae} = \frac{\sigma_{a2} + \sigma_{a1} \beta^2 f_d^2}{1 + \beta^2 f_d^2}. \quad (38)$$

Отсюда имеем

$1 \ll \beta \ll 1/f_d:$

$$\sigma_{xe} = \sigma_1 f_d, \quad \sigma_{ae} = \frac{\sigma_2}{\beta} + \sigma_1 \beta f_d^2, \quad (39)$$

$$\beta \gg 1/f_d: \quad \sigma_{xe} = \frac{\sigma_1}{f_d \beta^2}, \quad \sigma_{ae} = \frac{\sigma_1}{\beta}. \quad (40)$$

Выражение (39) для σ_{xe} справедливо при всех $\beta \ll 1/f_d$ вплоть до $\beta = 0$. При $\beta \gg 1/f_d$ величины σ_{xe} и σ_{ae} имеют нормальные асимптотики ($\sigma_{xe} \propto 1/\beta^2$, $\sigma_{ae} \propto 1/\beta$), однако выход на них «затянут» и происходит при экстремально больших магнитных полях.

В непосредственной близости к порогу протекания согласно (11) имеем

$$\xi_0 \ll \lambda: \quad f(p, \lambda) = \frac{2}{\pi} \lambda \ln \frac{b}{\lambda} \ll 1. \quad (41)$$

Отсюда

$$\beta \gg 1: \quad \sigma_{xe} = \frac{2}{\pi} \frac{\sigma_2}{\beta^2} \ln \left(\frac{b}{h} \beta^2 \right), \quad \sigma_{ae} = \frac{\sigma_2}{\beta}. \quad (42)$$

В этой области концентраций омическая составляющая σ_{xe} тензора эффективной проводимости зависит от напряженности магнитного поля аномальным образом: $\sigma_{xe} \propto H^{-2} \ln H$. При критической концентрации ($p = p_c$, $\xi_0 = 0$) величина σ_{xe} аномальным образом зависит от H при напряженности магнитного поля, удовлетворяющей условию $\beta \gg 1$. Если же $p \neq p_c$, но ξ_0 мало ($\xi_0 \ll \lambda$), то эта зависимость ограничена со стороны больших магнитных полей. Действительно, условие $\xi_0 \ll \lambda \propto h/\beta^2$ выполняется при $\beta^2 \ll h/\xi_0$. Поэтому аномальное поведение величины σ_{xe} ограничено интервалом напряженностей магнитного поля $1 \ll \beta \ll \sqrt{h/\xi_0}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
2. Б. И. Шкловский, ЖЭТФ **72**, 288 (1977).
3. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **93**, 1888 (1987).
4. А. М. Дыхне, ЖЭТФ **59**, 641 (1970).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **82**, 1333 (1982).
6. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol.(b) **76**, 475 (1976).
7. А. М. Дыхне, ЖЭТФ **59**, 110 (1970).
8. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **161**, 358 (2022).
9. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).

МЕХАНИЗМ ПОПЕРЕЧНОГО ТРАНСПОРТА ЗАРЯДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА

Д. Р. Исламов ^{a,b,*}, Т. В. Перевалов ^a, А. А. Гисматуллин ^a, И. А. Азаров ^a,

Е. В. Спесивцев ^a, В. А. Гриценко ^{a,c}

^a Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

^b Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия

^c Новосибирский государственный технический университет
630073, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2022 г.,
после переработки 2 ноября 2022 г.
Принята к публикации 2 ноября 2022 г.

Изучен механизм поперечного транспорта заряда через многослойный гексагональный нитрид бора (h-BN) в структурах металл–диэлектрик–полупроводник. Экспериментальные данные по транспорту проанализированы в рамках различных моделей переноса заряда в диэлектриках. Показано, что транспорт заряда через h-BN описывается моделью фонон-облегченного туннелирования между нейтральными ловушками. Определены значения термической и оптической энергий фонон-связанных ловушек в h-BN. Из анализа транспортных измерений, рентгеновских фотоэлектронных спектров и электронной структуры собственных дефектов в h-BN, рассчитанной методом *ab initio*, установлено, что наиболее вероятным дефектом, ответственным за транспорт заряда в h-BN, является дивакансия бор–азот. При этом транспорт заряда осуществляется электронами.

DOI: 10.31857/S0044451023030112
EDN: QEYBJE

1. ВВЕДЕНИЕ

Гексагональный нитрид бора (h-BN) является слоистым диэлектрическим материалом с широкой запрещенной зоной 5.5–6 эВ [1], перспективным для использования в качестве диэлектрика в различных твердотельных и гибких микроэлектронных устройствах [2–4]: в элементах резистивной памяти [5]; генераторах истинно случайных чисел [6, 7]; электронных синапсах для нейроморфных систем [8]. Однако перенос заряда через ультратонкие диэлектрические слои h-BN при приложении электрического напряжения до сих пор изучен недостаточно. А это — ключевое свойство диэлектрического материала, определяющее надежность и срок службы элек-

тронных устройств. Решение этой задачи является актуальным для внедрения h-BN в производство электронных элементов при дальнейшем масштабировании технологических процессов.

Транспорт заряда поперек механически расслоенных чешуек h-BN при толщине пленок 1–31 монослоев изучался в работе [9] с использованием методики проводящей атомно-силовой микроскопии (АСМ) [10]. Авторы отметили, что при толщинах слоев более 1 нм ток через h-BN описывается туннелированием через треугольный барьер по Фаулеру–Нордгейму, а в случае сверхтонких пленок (моно-, двойные и тройные слои) экспериментальные данные при малых напряжениях описываются моделью прямого туннелирования (через трапециевидный барьер) с переходом в туннелирование по Фаулеру–Нордгейму по мере повышения напряжения. Высота потенциального барьера для электронов на границе Si/h-BN была оценена в 3.07 эВ [9], что сравнимо с 3.2 эВ для Si/SiO₂ [11]. Следует от-

* E-mail: damir@isp.nsc.ru, d.islamov@g.nsu.ru

метить, что применение методики проводящей АСМ может приводить к ложному обнаружению туннелирования через трапецевидный либо треугольный барьер из-за ограниченности сканируемой площади (примерно 50 нм^2 [12]) механически расслоенных чешуек h-BN, которые имеют малое количество точечных дефектов.

В настоящее время для синтеза слоев h-BN в электронных приборах широко используется метод химического осаждения из паровой фазы (chemical vapour deposition, CVD) [13]. Данный метод широко применяется в полупроводниковой промышленности, он дешевле и приводит к меньшему количеству точечных дефектов в h-BN по сравнению с образцом h-BN, полученным магнетронным распылением или молекулярно-лучевой эпитаксией [13, 14]. Однако для h-BN, синтезированного методом CVD, концентрация точечных дефектов (вакансий, примеси, оборванных связей и т.п.) существенно выше, чем в механически расслоенном h-BN. В свою очередь, высокая концентрация дефектов в h-BN приводит к большим токам утечки и, как следствие, к снижению производительности приборов при использовании h-BN в качестве пассивного или активного диэлектрика [15, 16].

Целью настоящей работы является выявление механизмов переноса заряда через h-BN (перпендикулярно слоям), синтезированного методом CVD, а также выяснение природы дефектов, ответственных за данную проводимость.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Исследуемые в работе образцы представляли собой структуры металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) Ag/h-BN/Si. Многослойный h-BN толщиной 5–7 нм (17–19 слоев) был выращен на поликристаллической медной фольге методом CVD [17]. Далее h-BN был перенесен на подготовленные подложки p-Si ($2\text{--}4 \text{ мОм} \cdot \text{см}$) с использованием стандартного метода переноса через жидкость [17]. Верхние Ag-электроды толщиной 50 нм были нанесены на образцы h-BN/p-Si с помощью электронно-лучевого испарителя и теневой маски. Схематичное изображение полученных структур приведено на рис. 1а. Фотография пленки h-BN на подложке и напыленных контактных площадок приведена на рис. 1б. Видно, что пленка h-BN на части подложки образца повреждена. Поэтому для транспортных измерений использовалась группа контактов с поперечными размерами $50 \times 50 \text{ мкм}^2$.

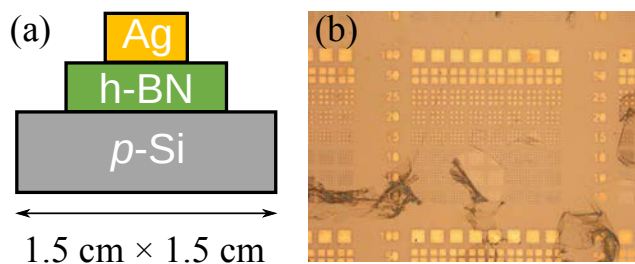


Рис. 1. МДП-структуры Ag/h-BN/Si: а — схематичное изображение поперечного среза; б — фотография пленки h-BN и контактных площадок. Числа в столбцах слева от структур соответствуют линейным размерам контактов в микрометрах

Морфология структур Ag/h-BN/p-Si контролировалась методами сканирующей АСМ (не приведено) и сканирующей эллипсометрии. 2D-профили толщины (d) и показателя преломления (n) h-BN на Si-подложке исследовались с помощью сканирующего монохроматического эллипсометра «Микроскан» (ИФП СО РАН, Новосибирск) [18]. Эллипсометрические углы Ψ и Δ измерялись при длине волны света $\lambda = 632.8 \text{ нм}$; угол падения луча на образец $\varphi = 60^\circ$. Пространственное разрешение прибора примерно 10 мкм (по осям x и y). Шаги сканирования по осям составляли 0.05 мм (x) и 0.02 мм (y). Измеренные значения эллипсометрических углов в каждой точке использовались для решения обратной задачи эллипсометрии. Для эллипсометрических расчетов далее использовалась оптическая модель: поглощающая подложка (Si) – прозрачная пленка (h-BN) – среда.

Измерение рентгеновских фотоэлектронных спектров (РФЭС) h-BN проводилось на спектрометре SPECS (Германия) с полусферическим анализатором PHOIBOS-150-MCD-9 и монохроматором FOCUS-500 (излучение AlK_α , $h\nu = 1486.74 \text{ эВ}$, 200 Вт). Положения фотоэлектронных линий калибровались по линии C1s (284.8 эВ). Атомные концентрации элементов в зоне анализа определялись по интегральным интенсивностям фотоэлектронных линий, скорректированных на соответствующие коэффициенты атомной чувствительности (0.486 для B1s , 1.0 для C1s , 1.8 для N1s и 2.93 для O1s).

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) синтезированных МДП-структур измерялись при температурах в диапазоне $300\text{--}450 \text{ К}$ с помощью универсального анализатора полупроводниковых приборов Keithley 4200-SCS и зондовой станции Cascade M150. Измерения проводились при отрицательной поляр-

ности напряжения на металлическом электроде, чтобы исключить влияние подложки на транспорт. Ниже при анализе экспериментальных данных приводятся абсолютные значения электрического поля для упрощения изложения.

Моделирование ВАХ в рамках различных моделей осуществлялось минимизацией функции

$$S(\mathbf{p}) = \frac{1}{N_{F,T}} \sqrt{\sum_{F_i, T_j} (\ln(J_{expt}) - \ln(J_{calc}))^2} = \frac{1}{N_{F,T}} \sqrt{\sum_{F_i, T_j} \left(\ln \left(\frac{J_{expt}}{J_{calc}} \right) \right)^2}, \quad (1)$$

где $N_{F,T}$ — общее количество экспериментально измеренных значений плотности тока J_{expt} при различных электрических полях F_i и температурах T_j (в настоящей работе $N_{F,T} = 200$), J_{calc} — рассчитанная плотность тока для соответствующей пары (F_i, T_j) . Квадрат разности логарифмов токов в выражении (1) используется вместо $(J_{expt}/J_{calc} - 1)^2$ ввиду экспоненциальной зависимости тока от электрического поля и температуры (обсуждается ниже в разд. 3.3). Стоит также отметить, что $(J_{expt}/J_{calc} - 1)^2$ является разложением в ряд Тэйлора суммируемой функции в (1) при $J_{calc} \rightarrow J_{expt}$. Вектор параметров приближения $\mathbf{p}$ соответствовал модели транспорта заряда, в рамках которой проводилось моделирование ВАХ. Минимизация функции S проводилась методом градиентного спуска с адаптивными шагами до достижения отклонения между итерациями l значения $|S_l - S_{l-1}| < 10^{-12}$. При этом целевая функция S достигала значения менее 10^{-2} .

Моделирование электронной структуры собственных дефектов в h-BN проводилось в рамках спин-поляризованной теории функционала плотности в модели периодической суперъячейки с плосковолновым базисом с энергией отсечки 1100 эВ и сохраняющими норму псевдопотенциалами Вандербилта [19] в программе QUANTUM ESPRESSO [20]. Использовался гибридный обменно-корреляционный функционал Хейда–Скузерии–Эрнцехофа [21]. Такой подход обеспечивает значение ширины запрещенной зоны h-BN, равное 5.75 эВ. Равновесные параметры решетки $a = 2.506 \text{ \AA}$, $c = 6.819 \text{ \AA}$ хорошо согласуются с экспериментальными значениями 2.504 Å и 6.661 Å [22]. При моделировании заряженных дефектов использовался метод нейтрализующего однородного фонового потенциала. Вакансия азота (V_N), вакансия бора (V_B) и дивакансия

бор–азот (V_{NB} , пара ближайших V_N и V_B) создавались удалением соответствующих атомов в 200-атомной суперъячейке h-BN, полученной $5 \times 5 \times 2$ -трансляцией элементарной ячейки, с последующей релаксацией. Такой размер суперъячейки разделяет периодические изображения дефектов на 12.5 Å в плоскости BN и на 14 Å по слоям. В расчетах использовались сетка $2 \times 2 \times 2$ k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна и сетка $2 \times 2 \times 2$ q -точек дискретизации оператора Фока. Расположение атомов оптимизировано с порогом сходимости полной силы 0.02 эВ/Å. Корректность сопоставления расчетных результатов для 3D-кристалла с данными для тонких пленок h-BN обуславливается идентичностью их ближнего порядка [23].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Эллипсометрия

С помощью сканирующей эллипсометрии получены 2D-профили толщины d (рис. 2a) и показателя преломления n для исследуемого образца h-BN. Значение n составило 1.51 ± 0.1 . Распределение толщины по поверхности сканирования приведено на рис. 2b. Видно, что максимум приходится на значение $d \approx 7 \text{ нм}$ с небольшим хвостом до 8.5 нм.

3.2. РФЭС

РФЭС-спектр h-BN помимо пиков, обусловленных В и N, иллюстрирует наличие С и О в зоне анализа пленки (глубина анализа около 3 нм). Спектры $B1s$ и $N1s$ имеют типичную для h-BN форму несимметричных гауссовых функций с максимумами при энергиях 190.6 и 398.2 эВ соответственно [24, 25] (рис. 3a). Наличие низкоинтенсивных пиков $B1s$ и $N1s$ со стороны больших значений энергии связи (191.8 и 399.5 эВ соответственно) является характерной особенностью CVD-пленок h-BN и обуславливается присутствием в пленке кислорода и углерода, формирующих связи О–В, О–В–N и С–N [24, 25]. Расчет соотношений атомных концентраций элементов показал, что доля С в зоне анализа составляет 20% и доля О — 9%. Столь высокое содержание С и О обусловлено особенностями технологии переноса пленки на Si-подложку, а также тем фактом, что пленки h-BN деградируют на воздухе. Отметим, что хранение и транспортировка

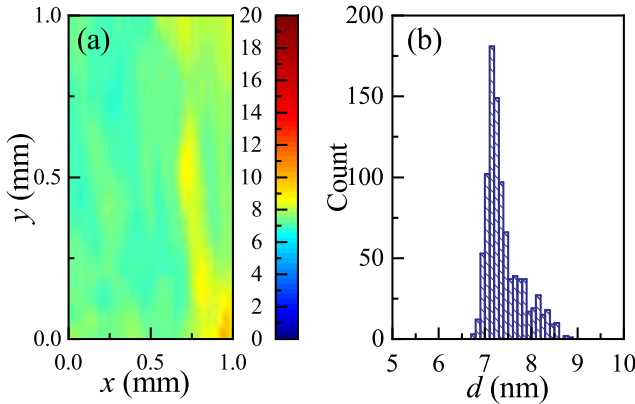


Рис. 2. Эллипсометрическое сканирование поверхности пленки h-BN на Si: *a* — карта толщин; *b* — распределение толщин

образца осуществлялась в специальном вакуумированном пакете.

Фотоэлектроны с уровня $N1s$, проходя через слой h-BN, теряют часть кинетической энергии на возбуждение межзонных переходов электронов, и спектр этих потерь отражается в высокоэнергетической части спектра $N1s$. По краю этого спектра потерь, путем его линейной интерполяции до уровня фона, оценивается значение ширины запрещенной зоны E_g h-BN (рис. 3*b*). Для исследуемого образца данный метод дает значение $E_g = 5.5$ эВ, что хорошо согласуется с данными других исследований [26, 27]. При этом полученное значение E_g для исследуемой пленки меньше, чем определенное для h-BN ранее $E_g = 6.0$ эВ [28, 29], вероятнее всего, ввиду относительно высокого содержания кислорода [30].

3.3. Транспорт

На рис. 4 символами представлены экспериментальные ВАХ для структуры Ag/h-BN/*p*-Si при различных температурах T в полулогарифмическом масштабе. Экспоненциальные зависимости тока от температуры и электрического поля показывают, что перенос заряда в структуре Ag/h-BN/*p*-Si не может быть описан ни туннельной инжекцией по Фаулеру–Нордгейму, ни прямым туннелированием через трапециевидный барьер. Следовательно, контактно-ограниченный перенос заряда в структуре Ag/h-BN/*p*-Si может быть связан с эффектом Шоттки [31], когда ток ограничен термоэлектронной эмиссией электронов над барьером, который

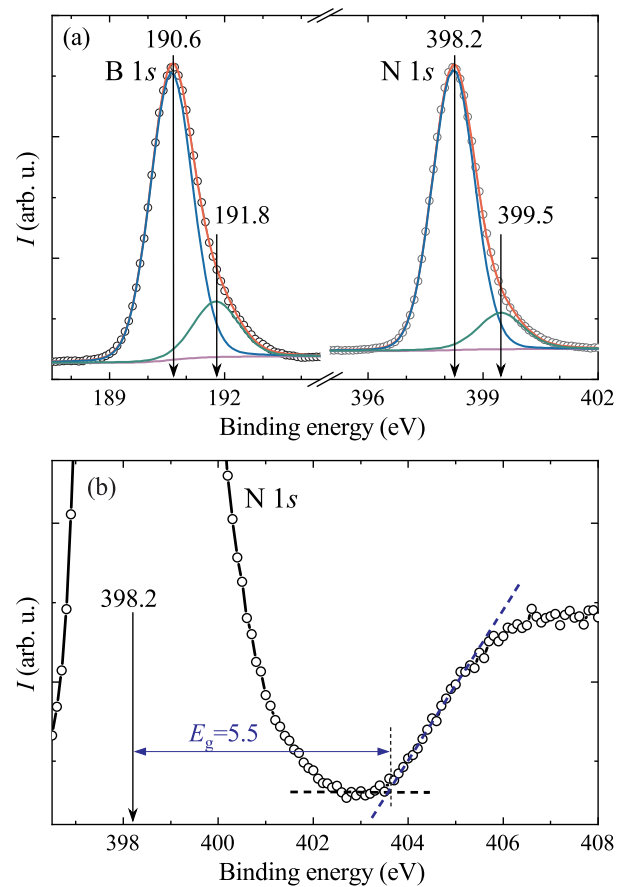


Рис. 3. *a*) Фрагменты РФЭС-спектра пленки h-BN: линии B1s и N1s (символы — экспериментальные данные, кривые — разложение на гауссовы функции. *b*) Фрагмент РФЭС-линии N1s, иллюстрирующий способ определения значения E_g пленки h-BN

уменьшается из-за сил изображения:

$$J = \frac{4\pi m^* k^2 e}{h^3} T^2 \exp \left(- \frac{\Phi - \sqrt{\frac{e^3}{4\pi\epsilon_\infty\epsilon_0} F}}{kT} \right). \quad (2)$$

Здесь m^* — эффективная масса носителя заряда в диэлектрике, k — постоянная Больцмана, e — заряд электрона (абсолютное значение), h — постоянная Планка, Φ — потенциальный барьер на границе Ag/h-BN, ϵ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость диэлектрика, ϵ_0 — электрическая постоянная.

На рис. 4*a* линиями представлены рассчитанные зависимости J – F – T при следующих значениях параметров: $\Phi = 0.2 \pm 0.02$ эВ, $\epsilon_\infty = 10 \pm 0.1$, $m^* = (1 \pm 0.1) \cdot 10^{-10} m_0$ (m_0 — масса свободного электрона). Значения параметров модели не соот-

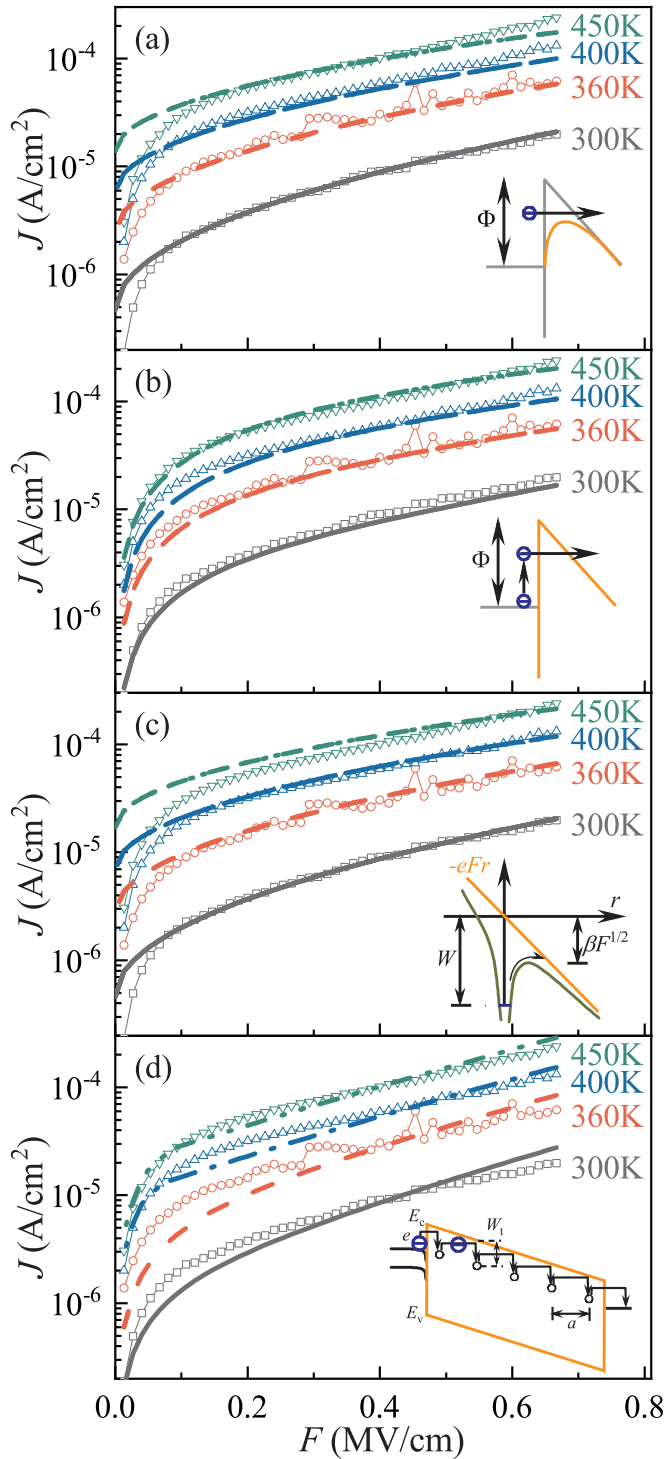


Рис. 4. Экспериментальные (символы) и рассчитанные для различных моделей (линии) ВАХ структуры Ag/h-BN/p-Si при различных температурах: *a* — эффект Шоттки; *b* — модель термически облегченного туннелирования; *c* — модель Френкеля; *d* — модель фонон-облегченного туннелирования между нейтральными ловушками. На вставках схематично представлены соответствующие сценарии переноса заряда в диэлектриках

ветствуют ожидаемым: $\Phi \approx 0.2$ эВ значительно ниже значения 3 эВ, ε_∞ существенно превышает поперечную компоненту тензора высокочастотной диэлектрической проницаемости h-BN $\varepsilon_{\perp,\infty} = 3.3\text{--}3.8$ [32]. Эффективная масса электрона, при которой модельные кривые совпадают с экспериментальными данными, имеет нефизично малое значение. Можно сделать вывод, что перенос заряда через МДП-структуры на основе h-BN некорректно описывается моделью эффекта Шоттки.

Акт термически облегченного туннелирования из контакта можно условно разделить на два этапа. Вначале электрон возбуждается до некоторой энергии за счет поглощения фононов (вертикальная стрелка на вставке рис. 4b). На втором шаге он туннелирует через треугольный барьер (горизонтальная стрелка на вставке рис. 4b). Выражение для плотности тока для инжекции носителей из металла имеет следующий вид [33, 34]:

$$J = \sqrt{2\pi m^* kT} \left(\frac{e}{h}\right)^2 F \times \exp\left(-\frac{\Phi - \frac{1}{6} \left(\frac{ehF}{4\pi kT \sqrt{m^*}}\right)^2}{kT}\right). \quad (3)$$

Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными в рамках модели термически облегченного туннелирования (3) приведено на рис. 4b. Эта модель описывает экспериментальные данные при разумном значении $m^* = (2.0 \pm 0.1)m_0$. Однако количественное согласие достигается при $\Phi = 0.2 \pm 0.02$ эВ и площади контакта 3 нм^2 при том, что реальная площадь металлического электрода в структуре Ag/h-NB/p-Si составляет 2500 мкм^2 . Можно сделать вывод, что термически облегченное туннелирование также не объясняет транспорт в h-BN.

Экспоненциальная зависимость тока от напряжения (электрического поля) указывает на то, что модели омической проводимости и проводимости, ограниченной пространственным зарядом, не применимы в данном случае. Наиболее известной в литературе моделью переноса носителей заряда через ловушки, демонстрирующей такое поведение, является ионизация изолированной ловушки по Френкелю [35]:

$$P = \nu \exp\left(-\frac{W - \beta_F \sqrt{F}}{kT}\right), \quad \beta_F = \sqrt{\frac{e^3}{\pi \varepsilon_\infty \varepsilon_0}}, \quad (4)$$

где P , ν и W — скорость ионизации, частотный фак-

тор и энергия ионизации ловушки соответственно. Ток рассчитывается согласно выражению

$$J = eN^{2/3}P, \quad (5)$$

где N — концентрация ловушек. В приближении равномерного распределения ловушек можно определить среднее расстояние между ними как $a = N^{-1/3}$. Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными в рамках модели Френкеля (4), (5) приведено на рис. 4с. Модель Френкеля предсказывает нефизично большое значение высокочастотной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_\infty = 40$. Значение энергии ионизации ловушки может быть определено из температурного разбега J – F – T -характеристик и составляет $W = 0.28 \pm 0.02$ эВ. В оригинальной работе [35] Френкель определил частотный фактор как $\nu \approx W/h$, и для энергии ловушки $W \approx 0.3$ эВ он составляет $\nu \sim 10^{14} \text{ с}^{-1}$. В этом случае выражения

(4) и (5) описывают экспериментальные данные при концентрации ловушек $N \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$, соответствующей неприемлемо большому расстоянию между ловушками $a \approx 200$ нм: на площадь 16-ти контактов изучаемых структур приходится только одна ловушка. Учитывая изложенные выше факты, можно сделать вывод, что эффект Френкеля количественно некорректно описывает перенос заряда через h-BN.

Ранее было показано, что транспорт во многих диэлектриках с высокой диэлектрической проницаемостью также не описывается моделью Френкеля, однако непротиворечивое объяснение экспериментальным данным удалось получить с привлечением модели фонон-облегченного туннелирования между нейтральными ловушками, предложенной Насыровым и Гриценко [36–42]. В настоящей работе мы проанализировали экспериментальные данные для структуры Ag/h-BN/p-Si в рамках этой модели [43]:

$$P = \frac{\sqrt{2\pi}\hbar W_t}{m^* a^2 \sqrt{(W_o - W_t)kT}} \exp\left(-\frac{W_o - W_t}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{2a\sqrt{2m^* W_t}}{\hbar}\right) \text{sh}\left(\frac{eFa}{2kT}\right), \quad (6)$$

где W_t и W_o — термическая и оптическая энергии ловушки. В выражении (6) предэкспоненциальный множитель представляет собой частотный фактор, первая экспонента соответствует термической ионизации с энергией активации $W_{rlx}/2 = (W_o - W_t)/2$ (здесь и далее W_{rlx} — энергия релаксации ловушки), следующий множитель отражает туннельный фактор, последний член указывает на уменьшение энергии активации из-за внешнего электрического поля. Заметим, что согласно выражению (6) среднее расстояние между ловушками можно определить по наклону экспериментальных данных, отложенных в полулогарифмическом масштабе при фиксированной температуре. Ток рассчитывается согласно выражению (5). Результаты моделирования приведены на рис. 4d линиями с различной штриховкой. Хорошее согласие рассчитанных зависимостей с экспериментальными достигается при следующих значениях параметров: $W_t = 0.58 \pm 0.01$ эВ, $W_o = 0.9 \pm 0.01$ эВ, $m^* = (2.14 \pm 0.001)m_0$, $a = 2.42 \pm 0.01$ нм ($N = (7.2 \pm 0.1) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$). Этим значениям в изучаемом интервале температур соответствует частотный фактор $(1.2\text{--}1.5) \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Следует отметить, что модель фонон-облегченного туннелирования между нейтральными ловушками предсказывает эффективную массу носителей заряда в h-BN $m^* = 2.14m_0$, что близко к теоретически рассчитанным методом *ab initio* значениям

$m_\perp^* = 2.2m_0$ для электронов и $m_\perp^* = 1.33m_0$ для дырок [44]. Среднее расстояние между ловушками 2.42 нм в 6–8 раз больше расстояния между слоями h-BN. Это означает, что ловушки изолированы друг от друга и не образуют непрерывного канала. При этом расстояние между ловушками обеспечивает туннельную прозрачность энергетического барьера между ними, что подтверждает применимость модели (6) для описания транспорта в h-BN.

Ранее в рамках модели многофононной ионизации нейтральных ловушек для аморфного нитрида бора были определены значения термической $W_t = 1.0$ эВ и оптической $W_o = 2.0$ эВ энергий ловушек [45]. Различие в энергиях ионизации ловушек в гексагональном и аморфном BN обусловлено различным ближним порядком в структуре этих материалов [23].

3.4. Моделирование методом *ab-initio*

Открытым остается вопрос о природе ловушек, участвующих в транспорте заряда в h-BN. Наиболее вероятными кандидатами являются вакансии азота и бора, а также дивакансия бор–азот (V_{NB}) [46]. Результаты моделирования электронной структуры V_B и V_N в h-BN описаны в ряде статей, в которых изучаются свойства, связанные с энергией образования, структурной релаксацией, мультиплетностью

основного состояния и уровнями переходных состояний [47–49]. Недавно было показано, что V_{NB} является наиболее вероятным парамагнитным дефектом в h-BN [46]. Для выяснения природы дефектов, ответственных за транспорт заряда через исследуемые пленки h-BN, в настоящей работе методом *ab initio* были рассчитаны значения термической $W_t^{e/h}$ и оптической $W_o^{e/h}$ энергий электронной и дырочной ионизаций V_B , V_N и V_{NB} , а также значения энергии формирования E_{form} нейтральных дефектов по формулам

$$W_t^{e/h} = (E_p^{-1/+1} - E_d^0) - (E_p^0 - E_d^{-1/+1}), \quad (7)$$

$$W_o^{e/h} = W_t^{e/h} + W_{rlx}^{e/h} = W_t^{e/h} + (E_{d(q=-1/+1)}^0 - E_{d(q=0)}^0), \quad (8)$$

$$E_{form} = E_d - E_p + \mu. \quad (9)$$

Здесь $E_p^{+1/0/-1}$ и $E_d^{+1/0/-1}$ — энергии идеальной и дефектной суперъячеек с полным зарядом $q = +1/0/-1$ соответственно; $E_{d(q=-1/+1)}^0$ — энергия дефектной суперъячейки с зарядом $q = 0$, рассчитанная для геометрии, соответствующей зарядовому состоянию $q = +1/0/-1$; μ — химический потенциал удаляемого атома, который для азота считался равным половине полной энергии молекулы N_2 , для бора — энергии отдельного атома бора в стабильной кристаллической α -фазе.

Для всех моделируемых дефектов значения W_t положительны (таблица), а поскольку рассчитываемая величина также отражает выигрыш в энергии при локализации заряда, можно сделать вывод, что захват как электрона, так и дырки на V_B , V_N и V_{NB} в h-BN энергетически выгоден. Следовательно, дефекты вакансионного типа в h-BN являются ловушками и для электронов, и для дырок. Однако с учетом ошибки метода расчета величины W_t , составляющей ± 0.15 эВ, полученные значения W_t и W_o количественно согласуются с экспериментальными только для электронной ионизации и только для дивакансий бор–азот: $W_t = 0.4$ эВ и $W_o = 0.75$ эВ. Отметим, что энергия релаксации ловушки $W_{rlx} = W_o - W_t = 0.35$ эВ совпадает с полученным из транспортных измерений значением $W_{rlx} = (0.9 - 0.58)$ эВ = 0.32 эВ. Кроме того, согласно расчетам, E_{form} для V_{NB} значительно меньше, чем сумма E_{form} для V_B и V_N (а также $V_B + V_B$ и $V_N + V_N$). Этот результат, в свою очередь, согласуется с данными работы [46], согласно которым V_B может мигрировать, образуя стабильную дива-

Таблица. Рассчитанные значения электронной и дырочной термической W_t и оптической W_o энергий ионизации, а также энергии формирования (в эВ) вакансии бора (V_B), вакансии азота (V_N) и дивакансии бор–азот (V_{NB}) в h-BN

	V_B	V_N	V_{NB}
W_t^e (V^{-1})	4.9	1.7	0.4
W_o^e (V^{-1})	5.0	2.1	0.75
W_t^h (V^{+1})	0.15	3.6	4.2
W_o^h (V^{+1})	0.16	3.9	5.2
E_{form}	8.4	10.9	12.6

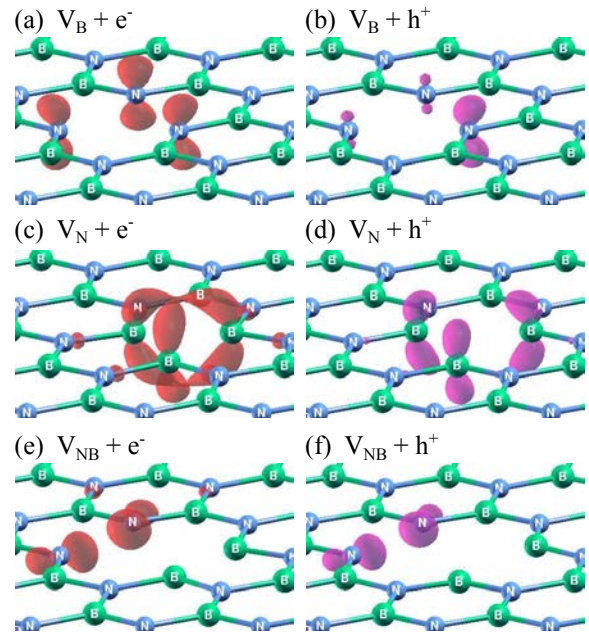


Рис. 5. Разница в распределении плотности полного заряда электронов для отрицательно заряженной и нейтральной суперъячеек h-BN для дефектов V_B (a), V_N (c) и V_{NB} (e), а также для нейтральной и положительно заряженной суперъячеек h-BN: V_B (b), V_N (d) и V_{NB} (f). Для простоты приведен один монослой суперъячейки h-BN, в котором находятся соответствующие дефекты

кансию V_{NB} . Следовательно, среди собственных дефектов вакансионного типа в h-BN ключевым является V_{NB} . Таким образом, по данным анализа транспортных измерений и рассчитанной методом *ab initio* электронной структуры собственных дефектов в h-BN можно заключить, что проводимость h-BN в исследуемых структурах Ag/h-BN/p-Si является электронной и осуществляется преимущественно по дивакансиям бор–азот.

Расчетное пространственное распределение электронной плотности добавленного в суперъячейку заряда подтверждает локализацию и электрона, и дырки на V_N , V_B и V_{NB} в h-BN, как показано на рис. 5. Дефекты вакансионного типа в h-BN способны локализовать как электроны, так и дырки. Для всех типов дефектов локализация заряда наблюдается на ближайших к вакансии атомах. Для V_B отрицательный заряд распределен равномерно, тогда как положительный заряд локализуется преимущественно на одном из атомов N. В структуре с V_N заряд равномерно распределяется между ближайшими атомами B. Для V_B и V_N распределение заряда имеет вид антисвязующих $2p^\pi$ -орбиталей, и в первом случае они перекрываются, а во втором — не перекрываются. Для V_{NB} добавленный заряд распределяется равномерно между парой ближайших атомов азота, причем распределение заряда принимает вид связующих σ -орбиталей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе показано, что поперечный транспорт заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора h-BN описывается фонон-облегченным туннелированием между нейтральными ловушками. Установлено, что энергетические параметры ловушек составляют $W_t = 0.58$ эВ и $W_o = 0.9$ эВ для термической и оптической энергий соответственно. Ловушки не перекрываются, разделены друг от друга несколькими слоями h-BN и не образуют непрерывного канала. Полученные данные в купе с результатами *ab initio*-моделирования указывают на то, что наиболее вероятным кандидатом на роль ловушки в h-BN является дивакансия бор–азот, а транспорт осуществляется электронами. Однако, ввиду поликристаллической природы исследуемых пленок h-BN, ловушки могут находиться как на границах зерен, так и вдали от них. Определение точного положения ловушек выходит за рамки настоящей работы.

Благодарности. Авторы выражают благодарность Марио Ланца (Mario Lanza) за предоставление образцов и помощь при проведении транспортных измерений. За предоставление измерительного оборудования авторы благодарят ЦКП «ВТАН» НГУ. Моделирование осуществлялось на кластере НКС-30Т Центра коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН» (ЦКП ССКЦ СО РАН).

Финансирование. Работа была выполнена в рамках государственного задания ИФП СО РАН №0306-2019-0005 (код (шифр) научной темы FWGW-2022-0003), а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №18-57-80006 БРИКС_т).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Cassabois, P. Valvin, and B. Gil, *Nature Photonics* **10**, 262 (2016).
2. K. L. Pey, A. Ranjan, N. Raghavan et al., in *2019 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS 2019)*, Monterey, California, USA (2019), p. 311.
3. M.-Y. Li, S.-K. Su, H.-S. P. Wong, and L.-J. Li, *Nature* **567**, 169 (2019).
4. D. Akinwande, C. Huyghebaert, C.-H. Wang et al., *Nature* **573**, 507 (2019).
5. J. Ge, H. Huang, Z. Ma et al., *Materials and Design* **198**, 109366 (2021).
6. A. Ranjan, N. Raghavan, S. J. O'Shea et al., *Sci. Rep.* **8**, 2854 (2018).
7. L. Jiang, Y. Shi, F. Hui et al., *ACS Appl. Mater. & Interfaces* **9**, 39758 (2017).
8. Y. Shi, X. Liang, B. Yuan et al., *Nature Electronics* **1**, 458 (2018).
9. G.-H. Lee, Y.-J. Yu, C. Lee et al., *Appl. Phys. Lett.* **99**, 243114 (2011).
10. F. Hui and M. Lanza, *Nature Electronics* **2**, 221 (2019).
11. L. A. Kasprzak, R. B. Laibowitz, and M. Ohring, *J. Appl. Phys.* **48**, 4281 (1977).
12. C. Pan, Y. Shi, F. Hui et al., in *Conductive Atomic Force Microscopy*, ed. by M. Lanza, ch. 1, Wiley-VCH Germany (2017).
13. F. Hui, C. Pan, Y. Shi et al., *Microelectr. Eng.* **163**, 119 (2016).
14. K. S. Novoselov, V. I. Fal'ko, L. Colombo et al., *Nature* **490**, 192 (2012).
15. C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric et al., *Nature Nanotechnology* **5**, 722 (2010).
16. H. Pandey, M. Shaygan, S. Sawallich et al., *IEEE Trans. Electron Devices* **65**, 4129 (2018).

17. C. Pan, Y. Ji, N. Xiao et al., *Adv. Funct. Mater.* **27**, 1604811 (2017).
18. С. В. Рыхлицкий, Е. В. Спесивцев, В. А. Швец, В. Ю. Прокопьев, ПТЭ № 3, 155 (2009).
19. D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **95**, 239906 (2017).
20. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
21. J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003).
22. V. L. Solozhenko, G. Will, and F. Elf, *Sol. St. Comm.* **96**, 1 (1995).
23. R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids*, Wiley-VCH, Germany (1998).
24. Z. H. Cui, A. J. Oyer, A. J. Glover et al., *Small* **10**, 2352 (2014).
25. H. Sediri, D. Pierucci, M. Hajlaoui et al., *Sci. Rep.* **5**, 16465 (2015).
26. L. Song, L. J. Ci, H. Lu et al., *Nano Lett.* **10** 3209 (2010).
27. H. Park, T. K. Kim, S. W. Cho et al., *Sci. Rep.* **7** 40091 (2017).
28. G. Cassaboies, P. Valvin, and B. Gil, *Nature Photonics* **10**, 262 (2016).
29. K. Watanabe, T. Taniguchi, and H. Kanda, *Nature Materials* **3**, 404 (2004).
30. R. S. Singh, R. Y. Tay, W. L. Chow et al., *Appl. Phys. Lett.* **104** 163101 (2014).
31. W. Schottky, *Phys. Z.* **15**, 872 (1914).
32. A. Laturia, M. L. V. de Put, and W. G. Vandenberghe, *npj 2D Mater. Appl.* **2**, 6 (2018).
33. G. G. Roberts and J. I. Polanco, *Phys. Stat. Sol. (a)* **1**, 409 (1970).
34. V. A. Gritsenko, E. E. Meerson, and Y. N. Morokov, *Phys. Rev. B* **57**, R2081 (1998).
35. Я. И. Френкель, *ЖЭТФ* **8**, 1292 (1938).
36. A. V. Shaposhnikov, T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko et al., *Appl. Phys. Lett.* **100**, 243506 (2012).
37. D. R. Islamov, V. A. Gritsenko, C. H. Cheng, and A. Chin, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 222901 (2014).
38. D. R. Islamov, T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko et al., *Appl. Phys. Lett.* **106**, 102906 (2015).
39. Д. Р. Исламов, А. Г. Черникова, М. Г. Козодаев и др., *Письма в ЖЭТФ* **102**, 610 (2015) [D. R. Islamov, A. G. Chernikova, M. G. Kozodaev et al., *JETP Lett.* **102**, 544 (2015)].
40. Д. Р. Исламов, В. А. Гриценко, А. Чин, *Автоматизация* **53**, 102 (2017) [D. R. Islamov, V. A. Gritsenko and A. Chin, *Optoelectr., Instrument. and Data Proc.* **53**, 184 (2017)].
41. V. A. Gritsenko, T. V. Perevalov, V. A. Voronkovskii et al., *ACS Appl. Mater. & Interfaces* **10**, 3769 (2018).
42. D. R. Islamov, V. A. Gritsenko, T. V. Perevalov et al., *Materialia* **15**, 100980 (2021).
43. К. А. Насыров, В. А. Гриценко, *ЖЭТФ* **139**, 1172 (2011) [K. A. Nasyrov and V. A. Gritsenko, *JETP* **112**, 1026 (2011)].
44. Y.-N. Xu and W. Y. Ching, *Phys. Rev. B* **44**, 7787 (1991).
45. Ю. Н. Новиков, В. А. Гриценко, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 498 (2021) [Yu. N. Novikov and V. A. Gritsenko, *JETP Lett.* **114**, 433 (2021)].
46. A. Zobelli, C. P. Ewels, A. Gloter, and G. Seifert, *Phys. Rev. B* **75**, 094104 (2007).
47. T. T. Tran, K. Bray, M. J. Ford et al., *Nature Nanotechnology* **11**, 37 (2015).
48. A. Sajid, J. R. Reimers, and M. J. Ford, *Phys. Rev. B* **97**, 064101 (2018).
49. L. Weston, D. Wickramaratne, M. Mackoite et al., *Phys. Rev. B* **97**, 214104 (2018).

КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ МЕЖСЛОЙНОЙ ПРОВОДИМОСТИ В МНОГОСЛОЙНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ

З.З. Алисултанов ^{a,b*}, Г.О. Абдуллаев ^b, П.Д. Григорьев ^{c,d}, Н.А. Демиров ^e

^a Международный центр теоретической физики им. А.А. Абрикосова Московского физико-технического института
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^b Институт физики им. Х.И. Амирханова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367015, Магачкала, Россия

^c Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^d Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
119049, Москва, Россия

^e Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 июля 2022 г.,
после переработки 30 августа 2022 г.
Принята к публикации 6 сентября 2022 г.

Исследованы квантовые и разностные осцилляции межслоевой проводимости в многослойной системе из тонких пленок топологических изоляторов. Из-за линейности спектра носителей в такой системе возникают новые особенности квантовых осцилляций. В частности, частоты осцилляций де Гааза–ван Альфена и Шубникова–де Гааза зависят от химического потенциала квадратично, а не линейно, как в случае систем с параболическим спектром носителей. По этой же причине фактор температурного затухания осцилляций содержит химический потенциал. Это связано с неэквидистантностью уровней Ландау: чем выше химический потенциал, тем меньше расстояние между уровнями Ландау. Однако частоты биений, а также разностных медленных осцилляций не зависят от химического потенциала, и в этом смысле поведение этих систем аналогично поведению обычных недираковских систем. Наконец, в борновском приближении (втором порядке крестовой диаграммной техники) мы рассмотрели общий случай, когда в межслоевой проводимости учитываются как внутризонные, так и межзонные переходы. Мы показали, что вклад межзонных переходов не существен для осцилляций проводимости при отсутствии магнитных примесей. Однако при наличии в спектре точки Дирака от нулевого уровня Ландау возникает линейный по магнитному полю межзонный вклад в проводимость. Этот вклад при низких температурах экспоненциально мал по сравнению с внутризонным вкладом и исчезает при нулевой температуре.

DOI: 10.31857/S0044451023030124
EDN: QFAGYG

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние три десятилетия магнитные квантовые осцилляции в квазидвумерных металлах вызвали большой экспериментальный интерес, по-

скольку позволили определять параметры электронной структуры различных перспективных материалов, таких как органические металлы [1–14] (см. также большое число более свежих результатов авторов процитированных работ), высокотемпературные сверхпроводники, включая различные купраты [15–24] и железосодержащие сверхпроводники [25–27], гетероструктуры и сверхрешетки [28], интеркалированный графит [29], различные вандерваальсовы кристаллы [30] и многие другие сло-

* E-mail: zaur0102@gmail.com

стые проводники [31]. Параллельно магнитные осцилляции в квазидвумерных металлах привлекли и большое внимание теоретиков [10–14, 32–49], поскольку обнаружился ряд новых качественных эффектов, особенно в проводимости [6, 11, 12], не описываемых в рамках традиционной теории, построенной как для обычных трехмерных металлов [50–52], так и для чисто двумерных электронных систем [53]. В обычных трехмерных металлах осцилляции в магнитном поле вызваны относительно малым числом носителей вблизи экстремальных сечений поверхности Ферми, из-за чего они являются достаточно слабыми и описываются теорией Лифшица–Косевича. В отличие от них квазидвумерные системы характеризуются достаточно большим относительным числом электронов, дающих вклад в осцилляции, и условие малой амплитуды и постоянства химического потенциала уже не выполняются [54], что приводит к неприменимости формализма Лифшица–Косевича, в частности, для температурной зависимости гармоник [37, 38]. Ферми-поверхность в квазидвумерных металлах представляет собой гофрированный цилиндр, и наличие двух экстремальных сечений (магнитное поле направлено поперек слоев) приводит к суперпозиции двух разных частот и тем самым возникновению биений:

$$\cos\left(\frac{\pi k \alpha \Delta S}{B} - \frac{\pi}{4}\right),$$

где ΔS — разность площадей экстремальных сечений ферми-поверхности. Фазовый множитель $\pi/4$ определяется из геометрических соображений и является универсальным для всех величин.

Экспериментально было показано наличие сдвига фазы биений осцилляций намагниченности относительно поперечной проводимости [1–6]. Сначала считалось, что этот сдвиг фазы вызван наличием малых карманов поверхности Ферми, однако вычисление зонной структуры показало неверность данного предположения [8]. Кроме того, в таких системах для проводимости наблюдаются так называемые медленные осцилляции. Выяснению физического механизма и объяснению этих эффектов посвящена работа [6, 11, 40, 49].

В работе [6] экспериментально показано и теоретически объяснено наличие зависящей от магнитного поля разности фаз биений между осцилляциями намагниченности и магнитосопротивления в кристалле β -(BEDT-TTF)2IBr2 при температуре $T \approx 0.6$ К в магнитном поле до 16 Тл. В рамках квазиклассического транспортного уравнения Больцмана показано, что наличие разности фаз связано

с тем, что во втором случае характер осцилляций определяется произведением времени релаксации, среднего квадрата скорости электронов на поверхности Ферми и плотности состояний, которые сами по себе носят осциллирующий характер, в то время как в определение намагниченности входит только плотность состояний. Данное смещение по фазе появляется, когда циклотронная энергия сравнивается с межслоевым интегралом перескока t , т. е. при достаточно больших значениях магнитного поля или сильной анизотропии.

В работе [11] рассмотрены медленные осцилляции межслоевой проводимости в (BEDT-TTF)2IBr2 и показано, что они связаны с гофрированностью поверхности Ферми. Здесь рассматривались осцилляции намагниченности и продольного магнитосопротивления при различных ориентациях магнитного поля. При этом частота биений и частота медленных осцилляций менялись коррелированным образом: $F_{slow}(\theta) = 2F_{beat}(\theta)$, где θ — угол наклона магнитного поля. Из этого можно сделать вывод, что физическое происхождение медленных осцилляций связано именно с особой формой поверхности Ферми. В рамках квазиклассического приближения (уравнение Больцмана) показано, что природа медленных осцилляций аналогична межподзонным осцилляциям: они возникают из-за нелинейности и наличия двух близких частот. При этом частота медленных осцилляций равна удвоенной частоте биений, что согласуется с экспериментом. Независимость медленных осцилляций от энергии приводит к отсутствию температурного множителя, т. е. амплитуда медленных осцилляций не зависит от температуры в рамках модели, учитывающей только упругое рассеяние на примесях. Это свойство медленных осцилляций также аналогично межподзонным осцилляциям в полупроводниках [55–57] и является общим для разностных осцилляций. Необходимо отметить, что фактор Дингла для медленных осцилляций отличается от такового для обычных осцилляций, так как макроскопическая пространственная неоднородность по своему действию подобна температуре, оба приводят к размытию поверхности Ферми [11, 12, 40]. Таким образом, фактор Дингла для медленных осцилляций содержит только рассеяние на микроскопических центрах, например, примесях. Учет электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий приведет к некоторой зависимости от температуры, однако температурное затухание медленных осцилляций все равно будет намного слабее по сравнению с затуханием обычных осцилляций Шубникова. Например, в (BEDT-TTF)2IBr2 экспе-

римент показывает, что повышение температуры от 0.56 до 1.4 К практически полностью подавляет быстрые осцилляции Шубникова, в то время как амплитуда медленных осцилляций практически не меняется [11]. Наблюдение медленных осцилляций позволяет оценить величину интеграла перескока, т. е. величину гофрировки поверхности Ферми [11]. Аналогично, в бислойных структурах медленные осцилляции позволяют определить величину межслоевого перескока электронов и помочь объяснению наблюдаемого гармонического состава магнитных квантовых осцилляций, например, как в купратах [48] или трителлуридах редкоземельных металлов [31]. С другой стороны, зависимость от температуры и магнитного поля позволяет получить информацию об основных процессах рассеяния электронов [11, 12]. Более строгие вычисления медленных осцилляций методами диаграммной техники были проведены как для межслоевой [40], так и для внутрислоевой [49] проводимости.

В настоящей работе мы исследуем медленные осцилляции межслоевой проводимости в многослойной системе из тонких пленок топологических изоляторов. Из-за линейности спектра носителей в такой системе возникают новые особенности квантовых и медленных осцилляций. В частности, по аналогии с графеном, частоты осцилляций де Гааза – ван Альфена и Шубникова – де Гааза зависят от химического потенциала квадратично, а не линейно, как в случае систем с параболическим спектром носителей. По этой же причине фактор температурного затухания осцилляций R_T^k содержит химический потенциал. Это связано с неэквидистантностью уровней Ландау: чем выше химический потенциал, тем меньше расстояние между уровнями Ландау при этом химическом потенциале. Похожая зависимость наблюдалась также в органических металлах с квазидвумерным дираковским спектром [13, 14]. Но как мы покажем ниже, частоты биений, а также медленных осцилляций не зависят от химического потенциала, и в этом смысле характер этих явлений схож с аналогичным в обычных недираковских системах.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 мы приводим всю необходимую информацию о гамильтониане и уровнях Ландау для многослойного топологического изолятора. В разд. 3 приведены расчеты термодинамических величин для плотности состояний, термодинамического потенциала и намагнитченности. В разд. 4 мы приводим расчеты межслоевой проводимости в тау-приближении. В этом же разделе мы исследуем медленные осцилля-

ции проводимости и указываем на новизну результатов по сравнению со другими случаями многослойных металлов. В разд. 5 мы приводим расчет межслоевой проводимости с учетом межзонных переходов. При этом все подробности расчетов всех упомянутых величин даются в Приложениях. В Заключение мы приводим основные результаты работы и обсуждаем некоторые возможности экспериментальной проверки предсказанных эффектов.

2. ГАМИЛЬТониан и уровни Ландау

Для исследования указанных выше эффектов в многослойном топологическом изоляторе (МТИ) мы воспользуемся моделью, предложенной в работе [58] (см. рис. 1). Было показано, что такая система при наличии магнитных примесей может рассматриваться как простейшая реализация трехмерного вейлевского полуметалла. Однако в настоящей работе нас не интересует режим вейлевского полуметалла. Мы не включаем в модель магнитные примеси.



Рис. 1. Схематическое изображение многослойной структуры. Незакрашенные участки обозначают слои топологических изоляторов (ТИ), а закрашенные — обычные зонные изоляторы

Гамильтониан гетероструктуры из топологических изоляторов и пленок из обычных диэлектриков может быть записан в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}_\perp, i, j} c_{\mathbf{k}_\perp i}^\dagger \left[v_F \tau^z (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp \delta_{i, j} + \Delta_S \tau^x \delta_{i, j} + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^+ \delta_{j, i+1} + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^- \delta_{j, i-1} \right] c_{\mathbf{k}_\perp j}, \quad (1)$$

где $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$ — импульс квазичастиц в двумерной зоне Бриллюэна поверхности ТИ, $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ — матрицы Паули, действующие на псевдоспиновую степень свободы (принадлежность верхней или нижней поверхностям ТИ), Δ_S и

Δ_D описывают туннелирование между верхней и нижней поверхностями слоев ТИ (Δ_S) и между верхней и нижней поверхностями диэлектрического слоя (Δ_D). Индексы i, j нумеруют слои топологического изолятора. Более детальную информацию о происхождении и свойствах этого гамильтониана можно найти в Приложении А. Этот гамильтониан приводит к спектру (см. Приложение А)

$$\varepsilon_k = \pm \sqrt{v_F^2 (k_x^2 + k_y^2) + \Delta^2(k_z)}, \quad (2)$$

где

$$\Delta^2(k_z) = \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - 2\Delta_S\Delta_D \cos k_z d$$

при $-\pi/d < k_z < \pi/d$. Если $|\Delta_S| = |\Delta_D|$ и $\text{sign}(\Delta_S\Delta_D) > 0$, то в спектре имеется точка, в которой запрещенная зона исчезает. Это точка $k_z d = 0$. Если $\text{sign}(\Delta_S\Delta_D) < 0$, то этой точкой является $k_z d = \pi$ (точки $k_z d = \pm\pi$ совпадают из-за периодичности зоны Бриллюэна). Если $|\Delta_S| \neq |\Delta_D|$, то спектр содержит запрещенную зону шириной $||\Delta_S| - |\Delta_D||$.

Для решения задачи квантования Ландау мы упростим гамильтониан (1). Легко показать (см. [59] и Приложение А), что низкоэнергетический гамильтониан в импульсном пространстве может быть записан в блочно-диагональной форме

$$\mathcal{H} = v_F(-\sigma_y k_x + \sigma_x k_y) + \sigma_z \Delta(k_z), \quad (3)$$

где

$$\hat{\Delta}(k_z) = \Delta_S \tau^x + \frac{1}{2} \Delta_D (\tau^+ e^{ik_z d} + \text{H.c.}).$$

В магнитном поле необходимо перейти к ковариантному оператору импульса

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}.$$

Здесь мы воспользуемся калибровкой Ландау $\mathbf{A} = (-Hy, 0, 0)$. Тогда собственные значения гамильтониана (3) легко вычисляются:

$$\varepsilon_n = \alpha \sqrt{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 n + \Delta^2(k_z)}, \quad n \neq 0, \quad (4)$$

$$\varepsilon_0 = \pm \Delta(k_z), \quad n = 0,$$

где $\alpha = \pm 1$ — зонный индекс, $l_H^{-2} = eH/\hbar c$. Отметим, что кратность вырождения ненулевых уровней Ландау в два раза больше, чем у нулевого.

3. КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ

В этом разделе мы рассмотрим квантовые осцилляции плотности состояний и намагниченности

для МТИ. Это так называемые осцилляции де Гааза–ван Альфена. Медленные осцилляции возникают для проводимости и представляют собой модуляцию осцилляций Шубникова–де Гааза, вызванную межслоевым взаимодействием. Следуя предыдущему разделу, все подробности вычислений мы также представили в Приложении В. Учитывая спектр МТИ, полученный в разд. 2, запишем плотность состояний в виде

$$\rho(\varepsilon) = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{\pi l_H^2} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \sum_{\alpha=\pm} \{ \delta(\varepsilon - \varepsilon_0) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \}, \quad (5)$$

где мы учли, что кратность вырождения ненулевых уровней Ландау в два раза больше, чем нулевого. Проводя суммирование с использованием стандартных приемов (см. Приложение В), получим

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0(\varepsilon) + \rho_{osc}(\varepsilon), \quad (6)$$

где

$$\rho_0(\varepsilon) = 2N N_{LL} \frac{|\varepsilon| \Theta(\varepsilon^2 - \Delta^2)}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}, \quad (7)$$

$$\rho_{osc}(\varepsilon) = \frac{L}{d} \frac{4|\varepsilon|}{\pi^2 l_H^2} \times$$

$$\times \text{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left[2\pi i k \frac{\varepsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] \mathcal{J}(k, \varepsilon), \quad (8)$$

$$\mathcal{J}(k, \varepsilon) = \int_0^{\pi} dk_z \exp \left[2\pi i k \frac{\Delta_S \Delta_D \cos k_z d}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] \times$$

$$\times \Theta(\varepsilon^2 - \Delta^2(k_z)). \quad (9)$$

Рассмотрим теперь большой термодинамический потенциал, который в общем виде дается выражением

$$\Omega = -T \int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) \ln(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}}) d\varepsilon. \quad (10)$$

Сразу отметим, что мы рассматриваем только положительные энергии. При низких температурах вклад от валентной зоны пренебрежимо мал. Учет отрицательных энергий не приводит к каким-либо заметным изменениям полученных ниже результатов. Нас будет интересовать только осциллирующая часть термодинамического потенциала, которая вычислена в Приложении В:

$$\Omega_{osc} \approx 2NN_{LL}T \sum_{k=1}^{\infty} \frac{J_0\left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}\right) \cos\left(\frac{\pi k}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} (\mu^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2)\right)}{k \operatorname{sh}\left(2\pi^2 \frac{kT\mu}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}\right)}. \quad (11)$$

Отсюда для намагнитченности $M = -\partial\Omega_{osc}/\partial B$ получаем выражение

$$M = -2N \frac{eT}{\pi \hbar c} \sum_k \frac{[J_0(ky_H) \left(\frac{1}{k} \cos(kx_H(\mu)) + x_H(\mu) \sin(kx_H(\mu))\right) + y_H J_1(ky_H) \cos(kx_H(\mu))]}{\operatorname{sh}\left(\frac{2\pi^2 k\mu T}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}\right)}, \quad (12)$$

где мы пренебрегаем членом, пропорциональным $T/v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2$, и

$$y_H = 2\pi \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}, \quad x_H(\varepsilon) = \pi \frac{\varepsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}.$$

В случае слабых магнитных полей $x_H(\mu) \gg y_H \gg 1$ (мы полагаем, что $\mu^2 > \Delta_S^2 + \Delta_D^2$). При μ , отличном от $\sqrt{\Delta_S^2 + \Delta_D^2}$, пренебрегаем первым и третьим членом:

$$M = -\frac{Ne(\mu^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2)}{\pi^2 \hbar c} \times \sum_k \sqrt{\frac{2}{\pi y_H}} \cos(ky_H - \frac{\pi}{4}) \sin(kx_H(\mu)) R_T^k, \quad (13)$$

где

$$R_T^k = \frac{2\pi^2 \mu}{\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2} \frac{T}{\operatorname{sh}\left(\frac{2\pi^2 k\mu T}{\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2}\right)}.$$

В отличие от двумерной системы, наличие межслойного перескока приводит к дополнительной модуляции квантовых осцилляций намагнитченности. Кроме того, линейность спектра носителей заряда приводит к тому, что период осцилляций определяется квадратом химического потенциала: $x_H(\mu) \sim \mu^2$. По этой же причине фактор температурного затухания осцилляций R_T^k содержит химический потенциал. Это связано с неэквидистантностью уровней Ландау: чем выше химический потенциал, тем меньше расстояние между уровнями Ландау при этом химическом потенциале. Соответственно, рост химического потенциала приводит к уменьшению амплитуды осцилляций при неизменной и отличной от нуля температуре.

4. МЕЖСЛОЙНЫЙ ТРАНСПОРТ

Теперь исследуем межслойный транспорт. Мы рассмотрим межслойную проводимость в рамках

простейшей тау-модели. Проводимость в этой модели дается формулой

$$\sigma_{zz} = e^2 \int_0^{\infty} d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) I(\varepsilon) \tau(\varepsilon), \quad (14)$$

с временами релаксации

$$\tau(\varepsilon)^{-1} = \frac{\pi n_{imp} u_0^2}{\hbar} \rho(\varepsilon), \quad (15)$$

где n_{imp} — концентрация примесей, u_0 — амплитуда примесного потенциала, а кинетический коэффициент $I(\varepsilon)$ определяется как

$$I(\varepsilon) = \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{n, k_z} |v_z|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n, k_z}). \quad (16)$$

Подробный расчет этой функции приведен в Приложении С. Мы здесь воспользуемся готовым выражением

$$I(\varepsilon) = NN_{LL} \frac{d^2}{2\pi \hbar^2} \frac{\Delta_S \Delta_D}{\varepsilon} \left[\frac{\pi \Delta_S \Delta_D}{2\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \cos\left(2\pi k \frac{\varepsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}\right) \times \right. \\ \left. \times J_1\left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}\right) \right]. \quad (17)$$

Из-за квантования Ландау величины $I(\varepsilon)$ и $\tau(\varepsilon)$ дают отдельные вклады в проводимость. В этом одна из причин, что осцилляции кинетических коэффициентов (эффект Шубникова–де Гааза) отличаются от квантовых осцилляций термодинамических величин (эффект де Гааза–ван Альфена). В частности, в слоистых системах это приводит к новому эффекту — необычной модуляции проводимости, которая получила название медленных осцилляций в пионерской работе [11]

При низких температурах вклад в проводимость вносят энергии вблизи химического потенциала. Учитывая, что $\mu \gg \Delta_S + \Delta_D$, мы можем опустить тета-функцию в (9). Тогда (детали расчета плотности состояний приведены в Приложении В)

$$\begin{aligned} \text{Im}(k, \varepsilon) &= \int_0^\pi dk_z \exp \left[2\pi i k \frac{\Delta_S \Delta_D \cos k_z d}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] = \\ &= \pi J_0 \left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Используя выражения (23) и (48) для терма $k = 1$, мы получим

$$I(\varepsilon)\tau(\varepsilon) = \frac{\Delta_S^2 \Delta_D^2 d^2}{4n_{imp} u_0^2 \hbar \varepsilon^2} \times$$

$$\begin{aligned} &\times \left[1 - \frac{2\sqrt{1+a^2}}{\pi} \sqrt{\frac{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}{\Delta_S \Delta_D}} \cos x_H \cos \left(y_H + \phi - \frac{\pi}{4} \right) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{\pi^2} \frac{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}{\Delta_S \Delta_D} \left(1 + \sqrt{1+a^2} \cos \left(2 \left(y_H + \frac{\phi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$a = \tan \phi = \frac{\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2}{\pi \Delta_S \Delta_D}.$$

Здесь мы оставили только члены до второго порядка включительно по функциям Бесселя. Поскольку наиболее значимой является область энергии вблизи уровня Ферми, при интегрировании по энергии полагаем $\varepsilon^2 \approx \mu^2 + 2\mu(\varepsilon - \mu)$ в аргументе для косинуса, а в знаменателе заменяем $\varepsilon^2 \approx \mu^2$. Для проводимости получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} &= \frac{e^2 \Delta_S^2 \Delta_D^2 d^2}{4n_{imp} u_0^2 \hbar \mu^2} \left[1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}{\Delta_S \Delta_D}} \sqrt{1+a^2} \cos(x_H(\mu)) \cos \left(y_H + \phi - \frac{\pi}{4} \right) R_T + \right. \\ &\left. + \frac{1}{\pi^2} \frac{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}{\Delta_S \Delta_D} \left(1 + \sqrt{1+a^2} \cos \left(2 \left(y_H + \frac{\phi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$R_T = \frac{2\pi^2 \mu}{\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2} \frac{T}{\text{sh} \left(\frac{2\pi^2 \mu T}{\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2} \right)}.$$

Как следует из полученного выражения, осцилляции межслойной проводимости смещены по фазе на значение ϕ от осцилляций намагниченности (см. рис. 2). Это смещение является функцией межслойных параметров перескока. При отсутствии межслойного взаимодействия это смещение обращается в нуль. Кроме того, в проводимости имеется осцилляционный член, не содержащий температуру.

В этой работе мы преимущественно используем тау-приближение теории электронного транспорта. Конечно, необходимо отметить, что строгий расчет квантовых осцилляций межслойной проводимости должен быть проведен в рамках диаграммной техники (частично мы это сделаем в следующем разделе). Это особенно важно при больших амплитудах осцилляций. В частности, проведенный одним из соавторов статьи расчет межслоевого магнитосопротивления и его медленных осцилляций с помощью тау-приближения и диаграммной техники (соответственно, формула (4) из статьи [9] и формулы (19), (21) из статьи [10]) показал, что имеется некоторое небольшое различие в амплитуде медленных осцилляций, вычисленной этими двумя методами. Это

различие возникает от членов вида $G^R G^R + G^A G^A$ в петле восприимчивости, которые исчезают, если пренебречь осциллирующей зависимостью собственной энергии электронов от энергии или от магнитного поля. Тем не менее остальные характеристики, такие как частота, остаются без изменений, и даже полевая зависимость амплитуды почти не меняется. Различие результатов этих двух методов расчета мало, потому что в этих работах, как и в нашей статье, осцилляции все-таки предполагаются слабыми и по их амплитуде идет разложение, т.е. медленные осцилляции вычисляются в низшем неисчезающем порядке теории возмущений по малой амплитуде квантовых осцилляций. Безусловно, для строгого количественного их описания нужен расчет методами диаграммной техники, но для качественного описания основных свойств медленных осцилляций достаточно и используемого в статье тау-приближения, конечно, с учётом того, что частота рассеяния $1/\tau$ в борновском приближении пропорциональна осциллирующей плотности состояний.

5. УЧЕТ МЕЖЗОННЫХ ПЕРЕХОДОВ

Рассмотрим теперь межслойную проводимость при учете межзонных переходов. В общем случае недиагонального матричного элемента операторо-

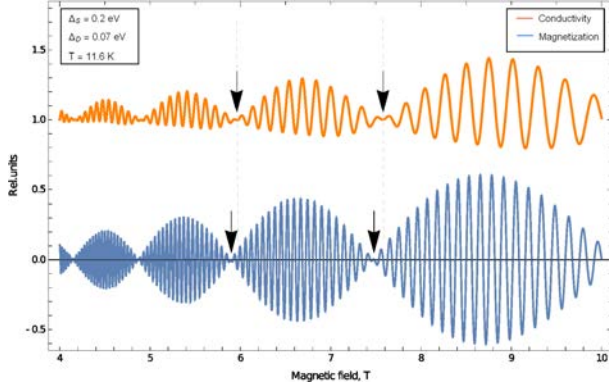


Рис. 2. Осцилляции межслойной проводимости (вверху) и намагниченности (внизу) при изменении величины магнитного поля в многослойном топологическом изоляторе со спектром, описываемым уравнениями (1) и (2)

ра скорости для межслойной проводимости имеем следующее выражение:

$$\sigma_z = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \Sigma_z(\varepsilon). \quad (21)$$

Здесь

$$\Sigma_z(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar e^2}{3V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2}^z V_{k_2 k_1}^z A_{k_1}(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon), \quad (22)$$

где $V_{k_1 k_2}^z = \langle k_1 | \hat{V}_z | k_2 \rangle$ — матричный элемент оператора скорости вдоль оси Z (поперек слоев)

$$\hat{V}_z = \frac{\Delta_D d}{\hbar} \sigma^z \otimes [\tau^x \sin(k_z d) + \tau^y \cos(k_z d)], \quad (23)$$

$A_k(\varepsilon)$ — спектральная функция, а через k обозначены квантовые числа: волновые векторы, номер уровней Ландау, индексы зон и подзон.

Вывод этой формулы приведен в Приложении D. Собственные векторы гамильтониана, которые входят в матричные элементы, получены в работе [59]

$$|ns\alpha\rangle = |u_\alpha\rangle \otimes |v_n^{s\alpha}\rangle, \quad (24)$$

$$|u_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1, \alpha \frac{\Delta_S + \Delta_D e^{-ik_z d}}{\Delta(k_z)} \right)^T, \quad (25)$$

$$|v_n^{s\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha \Delta(k_z)}{\epsilon_{ns\alpha}}}, i s \sqrt{1 - \frac{\alpha \Delta(k_z)}{\epsilon_{ns\alpha}}} \right)^T, \quad (26)$$

где $s = \pm 1$ — индекс, различающий электронные и дырочные состояния, а $\alpha = \pm 1$ — индекс, различающий две ветви спектра с различными киральностями. Для дираковского полуметалла, с которым мы

здесь имеем дело, эти ветви совпадают, давая лишь двукратное вырождение энергии. При наличии магнитных примесей происходит зеемановское расщепление уровней и эти ветви смещаются друг относительно друга, пересекаясь в двух точках Вейля, характеризующихся противоположными киральностями. В нашем случае спектр не зависит от индекса α , а в плотность состояний он войдет как коэффициент 2, учитывающий дополнительное вырождение. По этой причине вместо двух собственных состояний $|ns\pm\rangle$ необходимо рассмотреть их линейную комбинацию $\beta_1 |ns+\rangle + \beta_2 |ns-\rangle$. Мы же несколько упростим ситуацию, взяв собственные состояния с одним значением этого индекса, например, с $\alpha = 1$. Такой выбор никак не скажется на наших результатах, пока система не содержит магнитных примесей. В этом случае

$$\sigma_z = \frac{2\pi\hbar e^2}{3V} \sum_{n, k_z, \alpha, \beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \times \langle \alpha | \hat{V}_z^n | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_z^n | \alpha \rangle A_{n\alpha}(k_z, \varepsilon) A_{n\beta}(k_z, \varepsilon), \quad (27)$$

где $\langle \pm | \hat{V}_z^n | \pm \rangle = \langle n \pm | \hat{V}_z | n \pm \rangle$. Вычислим матричные элементы

$$\langle u | \tau^x | u \rangle = \frac{\Delta_S + \Delta_D \cos(k_z d)}{\Delta(k_z)}, \quad (28)$$

$$\langle u | \tau^y | u \rangle = -\frac{\Delta_D \sin(k_z d)}{\Delta(k_z)}, \quad (29)$$

$$\langle v_n^+ | \sigma^z | v_n^- \rangle = \langle v_n^- | \sigma^z | v_n^+ \rangle = \sqrt{1 - \frac{\Delta^2(k_z)}{\epsilon_n^2}} = \mathcal{W}, \quad (30)$$

$$\langle v_n^+ | \sigma^z | v_n^+ \rangle = \frac{\Delta(k_z)}{\epsilon_n} = \mathcal{V} = -\langle v_n^- | \sigma^z | v_n^- \rangle. \quad (31)$$

Тогда

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar e^2}{3V} \sum_{n, k_z} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \times [\mathcal{V}^2 (A_{n+}^2(k_z, \varepsilon) + A_{n-}^2(k_z, \varepsilon)) + 2\mathcal{W}^2 A_{n+}(k_z, \varepsilon) A_{n-}(k_z, \varepsilon)]. \quad (32)$$

В тау-приближении, когда число примесей мало, имеем

$$A_{n\pm}^2(k_z, \varepsilon) \rightarrow \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(\varepsilon \mp \epsilon_{nk_z}) \tau(\varepsilon). \quad (33)$$

В этом приближении первое слагаемое полученного выражения есть не что иное, как вычисленная

нами в предыдущем разделе межслойная проводимость, в которой учтены только внутризонные переходы (в зоне проводимости и в валентной зоне). Второе слагаемое представляет собой поправку из-за межзонных переходов:

$$\delta\sigma_z = \frac{4\pi\hbar e^2}{3V} \sum_{n,k_z} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \times \\ \times W_{n,k_z}^2 A_{n+}(k_z, \varepsilon) A_{n-}(k_z, \varepsilon). \quad (34)$$

Понятно, что при наличии зеемановского расщепления уровней возникнут дополнительные межзонные переходы и поправка к проводимости будет иметь более сложный вид.

Исследуем полученную поправку к межслойной проводимости. При низкой концентрации примесей ($n_i \rightarrow 0$) межзонный вклад отличен от нуля только для нулевого уровня Ландау и только если $|\Delta_S| = |\Delta_D| = \Delta$, т.е. когда в спектре имеется точка Дирака. Действительно, в этом случае $A_{n\pm}(k_z, \varepsilon) \rightarrow \delta(\varepsilon \mp \epsilon_{nk_z})$, а нулевой уровень Ландау $\varepsilon_0 = \pm\Delta(k_z) \approx \pm\Delta dk_z$ содержит точку Дирака при $k_z = 0$, которая и дает ненулевой вклад в интеграл. В этой точке Дирака

$$W_{0,k_z=0}^2 = \frac{d^2\Delta^2}{2\hbar^2}.$$

Тогда

$$\delta\sigma = \frac{e^3}{\hbar^3} \frac{d\Delta H}{\mu\pi c} \frac{\beta\mu}{4\text{ch}^2 \frac{\beta\mu}{2}}. \quad (35)$$

Как видно из этого выражения, при нулевой температуре межзонный вклад исчезает. При низких температурах ($\beta\mu \gg 1$) этот вклад экспоненциально мал. Однако при выводе этого выражения мы не использовали приближение низких температур. При $\beta\mu > 1$ имеем $\delta\sigma \sim \beta\mu e^{-\beta\mu}$, а при $\beta\mu < 1$ экспоненциальный фактор исчезает $\delta\sigma \sim \beta\mu$. Эффект исчезновения межслойного вклада при отсутствии точек Дирака связан с тем, что мы выбрали спектральные функции в виде дельта-функций, что справедливо в пределе $n_i \rightarrow 0$ (на самом деле имеется в виду предел большого значения времени рассеяния, что часто означает малое число примесей). Физически это означает, что усредненное рассеяние электронов на примесях слабое и соответствующим уширением уровней Ландау можно пренебречь. Наличие точки Дирака дает бесщелевой нулевой уровень Ландау, через который и возникает межзонный вклад в проводимость. В общем случае исходный дельта-пик спектральной функции уширяется и, строго говоря,

межзонный вклад будут давать и ненулевые уровни Ландау. Однако основной вклад по-прежнему будет давать нулевой уровень.

Еще раз отметим, что межзонный вклад $\delta\sigma_z$ исчезает, если в спектре нет точек Дирака. Таким образом, наличие такого вклада в межслойной проводимости может быть предложено как метод идентификации точек Дирака в спектре. Исследование межзонного вклада в бесщелевом случае заслуживает отдельного внимания. Особенно это важно, если многослойный ТИ содержит магнитные примеси, которые за счет нарушения Т-симметрии расщепляют дираковский спектр на два вейлевских. В этом случае многослойный ТИ становится вейлевским полуметаллом с устойчивыми точками Вейля и соответствующими бесщелевыми нулевыми уровнями Ландау.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в данной работе эффекты могут быть экспериментально исследованы, например, в гетероструктуре, состоящей из тонких пленок Bi_2Se_3 , разделенных тонкими слоями обычных диэлектриков. В работах [60–62] была продемонстрирована возможность выращивать ультратонкие высококачественные пленки Bi_2Se_3 . В качестве других материалов, гетероструктуры из которых могут выступать кандидатами для надежной проверки исследованных эффектов, можно назвать Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 , топологические свойства которых хорошо известны [63–67].

Как одно из интересных направлений обобщения полученных здесь результатов можно отметить исследование межслойного транспорта в многослойных структурах, состоящих из тонких пленок топологических изоляторов и сверхпроводников. Например, можно предложить структуру на основе $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{NbSe}_2$ [68], в которой возникают так называемые майорановские моды, что, по-видимому, существенно скажется на квантовых осцилляциях межслойного транспорта.

В заключении отметим, что представляет большой интерес исследовать влияние магнитных примесей на медленные осцилляции в МТИ, т.е. рассмотреть режим вейлевского полуметалла с нарушенной Т-симметрией (см., например, [58, 69–71]). Предварительные расчеты показывают, что возникает новая характерная частота модуляции основной моды квантовых осцилляций. Эта частота связана со сдвигом конусов Дирака из-за нарушения Т-

симметрии и определяется расстоянием между точками Вейля. Кроме того, при наличии магнитных примесей более существенными будут поправки к проводимости от межзонных и межподзонных переходов. Эти эффекты — предмет отдельного рассмотрения.

Финансирование. Работа одного из соавторов (А.З.З.) выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-72-00110), другого (П.Д.Г.) — при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 21-52-12043 и 21-52-12027) и в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (грант НИТУ «МИСиС» № K2-2022-025).

Приложение А. Гамильтониан и спектр

Гамильтониан гетероструктуры из топологических изоляторов и пленок из обычных диэлектриков может быть записан в виде (см. [58])

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}_\perp, i, j} c_{\mathbf{k}_\perp i}^\dagger \left[v_F \tau^z (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp \delta_{i, j} + \Delta_S \tau^x \delta_{i, j} + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^+ \delta_{j, i+1} + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^- \delta_{j, i-1} \right] c_{\mathbf{k}_\perp j}. \quad (36)$$

Здесь $\hat{z}$ — единичный вектор в направлении Z . Тогда

$$[\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{k}_\perp = -\sigma_y k_x + \sigma_x k_y,$$

что есть гамильтониан киральных дираковских электронов на одной из поверхностей топологического изолятора. Запись $[\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{k}_\perp$ соответствует киральности, которую можно легко понять с помощью правила левой руки: положите левую руку на поверхность стола ладонью вниз. Тогда четыре вытянутых пальца покажут направление импульса, а отогнутый на 90 град большой палец покажет направление спина. Такая ориентация соответствует одной киральности. Состояние с противоположной киральностью можно представить аналогично, только вместо левой руки следует взять правую. Две поверхности ТИ учитываются матрицей Паули τ^z , которая содержит два значения киральности. Индексы i, j нумеруют слои топологического изолятора. Член с Δ_S соответствует перескокам между верхней и нижней поверхностями одного и того же слоя. Гамильтониан записан в базисе состояний $\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T, \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$, которые обозначают принадлежность к верхней и нижней поверхностям данного слоя топологического изолятора. В этом

базисе смешивание поверхностей (перескоки между ними) дается матрицей Паули τ^x :

$$\tau^x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \tau^x \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Дельта-функция $\delta_{i, j}$ в этом слагаемом обозначает, что эти перескоки происходят внутри одного слоя. Оставшиеся члены описывают перекоки между соседними слоями ТИ через обычный диэлектрик. Слагаемое с τ^+ обозначает перескоки с нижней поверхности данного слоя на верхнюю поверхность нижнего соседнего слоя: дельта символ $\delta_{j, i+1}$ отличен от нуля для переходов $j \rightarrow i = j - 1$. Это видно из явного вида матрицы

$$\frac{1}{2} \tau^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

которая переводит состояние $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$ (соответствующее нижней поверхности) в $\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ (соответствующее верхней поверхности), но не наоборот. А слагаемое с τ^- обозначает перескоки с верхней поверхности данного слоя на нижнюю поверхность верхнего соседнего слоя: дельта символ $\delta_{j, i-1}$ отличен от нуля для переходов $j \rightarrow i = j + 1$. Матрица

$$\frac{1}{2} \tau^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

переводит состояние $\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ в $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$, но не наоборот.

Найдем спектр, соответствующий такому гамильтониану. Для этого представим все дельта-символы через фурье-образы

$$\mathcal{H} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_\perp, i, j, k_z} e^{ik_z(r_i - r_j)} c_{\mathbf{k}_\perp i}^\dagger \left[v_F \tau^z (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp + \Delta_S \tau^x + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^+ e^{ik_z d} + \frac{1}{2} \Delta_D \tau^- e^{-ik_z d} \right] c_{\mathbf{k}_\perp j}, \quad (37)$$

где мы воспользовались представлением

$$\delta_{i, j} = \frac{1}{N} \sum_{k_z} e^{ik_z(r_i - r_j)}.$$

Здесь $r_{i \pm 1} = r_i \pm d$, а N — число слоев. Соответственно, в импульсном пространстве имеем

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} v_F (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp & \Delta_S + \Delta_D e^{ik_z d} \\ \Delta_S + \Delta_D e^{-ik_z d} & -v_F (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp \end{pmatrix}.$$

Спектр такого гамильтониана легко найти:

$$\varepsilon_k = \pm \sqrt{v_F^2 (k_x^2 + k_y^2) + \Delta^2 (k_z)}, \quad (38)$$

где

$$\Delta^2(k_z) = \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - 2\Delta_S\Delta_D \cos k_z d.$$

Гамильтониан обладает $SO(3)$ симметрией:

$$e^{i\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\phi}} \mathcal{H}_k e^{-i\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\phi}} = \mathcal{H}_k.$$

Поэтому его можно представить в блочно-диагональной форме $\mathcal{H}_k = \tau^z \tilde{\mathcal{H}}_k$, где

$$\tilde{\mathcal{H}}_k = v_F (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{k}_\perp + \sigma_z \Delta(k_z).$$

Это означает, что достаточно работать с одним из блоков такой формы.

Приложение В.

Плотность состояний, термодинамический потенциал и намагниченность

Для плотности состояний имеем формулу (5). Воспользуемся формулой Пуассона

$$\begin{aligned} f(0) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} f(n) &= \\ &= 2 \int_0^{\infty} f(x) dx + 4 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} f(x) e^{2\pi i k x} dx. \end{aligned} \quad (39)$$

Рассмотрим осциллирующую и неосциллирующую части по отдельности. Для неосциллирующей части имеем

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{L}{\pi} N_{LL} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dk_z \sum_{\alpha=\pm} \int_0^{\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_x) dx, \quad (40)$$

где $N_{LL} = 1/\pi l_H^2$ — степень вырождения уровней Ландау. Проводя суммирование по зонному индексу, получаем

$$\begin{aligned} \rho_0(\varepsilon) &= \frac{2LN_{LL}}{\pi} |\varepsilon| \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dk_z \times \\ &\times \int_0^{\infty} \delta(\varepsilon^2 - 2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x - \Delta^2(k_z)) dx. \end{aligned} \quad (41)$$

Проводя сначала интегрирование по k_z , получим

$$\begin{aligned} \rho_0(\varepsilon) &= 2NN_{LL} \frac{|\varepsilon| \Theta(\varepsilon^2 - \Delta^2)}{\pi \Delta_S \Delta_D} \times \\ &\times \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{(2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \varepsilon^2)^2}{(2\Delta_S \Delta_D)^2}}}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} x_{min} &= \frac{\varepsilon^2 - (\Delta_S + \Delta_D)^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}, \\ x_{max} &= \frac{\varepsilon^2 - (\Delta_S - \Delta_D)^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}, \end{aligned}$$

$\Delta = |\Delta_S - \Delta_D|$, и $N = L/d$ — число слоев. Плотность состояний содержит сингулярные точки, которые соответствуют минимуму и максимуму косинусоидального профиля уровней Ландау. Например, для нулевого уровня это точки $\varepsilon_{\pm}^2 = (\Delta_S \pm \Delta_D)^2$. Это есть не что иное, как сингулярности ван Хофа. Действительно, вблизи своих экстремумов спектр становится плоским, что приводит к сингулярности плотности состояний из-за вырожденности уровней Ландау. Чтобы проинтегрировать по x , перейдем к новой переменной:

$$\begin{aligned} \frac{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \varepsilon^2}{2\Delta_S \Delta_D} &= \cos y, \\ dx &= \frac{-\Delta_S \Delta_D \sin y dy}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}. \end{aligned}$$

После элементарного интегрирования получаем формулу (7).

Рассмотрим теперь осциллирующую часть

$$\begin{aligned} \rho_{osc}(\varepsilon) &= 2NN_{LL} \frac{|\varepsilon|}{\pi} \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \times \\ &\times \int_0^{\infty} \delta(\varepsilon^2 - 2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x - \Delta^2(k_z)) e^{2\pi i k x} dx. \end{aligned} \quad (42)$$

Проинтегрируем сначала по x :

$$\begin{aligned} \rho_{osc}(\varepsilon) &= 2NN_{LL} \frac{|\varepsilon|}{\pi} \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \times \\ &\times \exp \left[2\pi i k \frac{\varepsilon^2 - \Delta^2(k_z)}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] \Theta(\varepsilon^2 - \Delta^2(k_z)). \end{aligned} \quad (43)$$

Интегрирование по k_z окончательно дает выражение (8).

Получим теперь выражение для осциллирующей части термодинамического потенциала. Подставляя в формулу (10) выражение для плотности состояний, получим

$$\Omega_{osc} = -2NN_{LL} \frac{T}{\pi} \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon d\varepsilon \times$$

$$\times \exp \left[\pi i k \frac{\varepsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] \mathcal{J}(k, \varepsilon) \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}} \right). \quad (44)$$

Введем промежуточные обозначения

$$\alpha = \frac{\pi k}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}, \quad \beta = \pi k \frac{\Delta_S^2 + \Delta_D^2}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2}.$$

При интегрировании по энергиям возникает интеграл

$$I = \int_0^\infty \varepsilon \exp [i(\alpha \varepsilon^2 - \beta)] \times \Theta(\varepsilon^2 - \Delta^2(k_z)) \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}} \right) d\varepsilon. \quad (45)$$

Представим интеграл в виде

$$I = \frac{1}{2} \int_{\Delta(k_z)}^\infty \exp [i(\alpha \varepsilon^2 - \beta)] \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}} \right) d\varepsilon^2 \quad (46)$$

и проинтегрируем сначала по частям:

$$I = -\frac{e^{-i\beta}}{2i\alpha} \left[\frac{\mu - \Delta(k_z)}{T} e^{i\alpha \Delta^2(k_z)} - \frac{1}{T} \int_{\Delta(k_z)}^\infty \frac{e^{i\alpha \varepsilon^2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{T}} + 1} \right] = \\ = -\frac{e^{-i\beta}}{2i\alpha} \left[\frac{\mu - \Delta(k_z)}{T} e^{i\alpha \Delta^2(k_z)} - \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{i\alpha(yT + \mu)^2} dy}{e^y + 1} \right], \quad (47)$$

где мы заменили нижний интеграл на $-\infty$, поскольку используется приближение $\frac{\mu - \Delta}{T} \gg 1$.

Прежде всего, разберемся с первым слагаемым. Проводя интегрирование по k_z в термодинамическом потенциале, находим

$$e^{-i\beta} \int_0^\pi dk_z \exp \left[2\pi i k \frac{\Delta_S \Delta_D \cos k_z d}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] e^{i\alpha \Delta^2(k_z)} \times \\ \times (\mu - \Delta(k_z)) = e^{-i\beta} \int_0^\pi dk_z (\mu - \Delta(k_z)) e^{i\beta} = \\ = \int_0^\pi dk_z (\mu - \Delta(k_z)).$$

Этот интеграл действителен. Следовательно, вклад от первого слагаемого (47) в термодинамический потенциал равен нулю.

Далее, рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{\exp(i\alpha(yT + \mu)^2) dy}{e^y + 1} = \\ = -2\pi i \sum_{n=0}^\infty e^{-2\pi(2n+1)\alpha T \mu} \times \\ \times \exp \left(i\alpha \left(\mu^2 + (2n+1)^2 \pi^2 T^2 \right) \right), \quad (48)$$

где мы воспользовались методом вычетов. Отсюда

$$I = -\frac{\pi}{\alpha} \sum_{n=0}^\infty e^{-2\pi(2n+1)\alpha T \mu} \times \\ \times \exp \left(i\alpha \left(\mu^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2 + (2n+1)^2 \pi^2 T^2 \right) \right).$$

Подставляя это выражение в термодинамический потенциал, интегрируя по k_z и учитывая, что

$$\int_0^\pi dk_z \exp \left[2\pi i k \frac{\Delta_S \Delta_D \cos k_z d}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right] = J_0 \left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right),$$

окончательно получим

$$\Omega_{osc} = 4NN_{LL}T \sum_{k=1}^\infty \frac{J_0 \left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right)}{k} \times \\ \times \sum_{n=0}^\infty \exp \left(-2\pi^2 \frac{(2n+1)kT\mu}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) \times \\ \times \cos \left(\frac{\pi k}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \left(\mu^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2 + (2n+1)^2 \pi^2 T^2 \right) \right). \quad (49)$$

В силу быстрой сходимости ряда по n мы пренебрегаем зависимостью осциллирующей части от n . Тогда ряд легко суммируется, и мы получаем выражение (19).

Приложение С. Межслойный транспорт

Исследуем поведение функции $I(\varepsilon)$. Для скорости v_z из спектра получим

$$v_z = \frac{\partial \varepsilon_{n,k_z}}{\hbar \partial k_z} = -\frac{d\Delta_S \Delta_D}{\hbar} \frac{\sin k_z d}{\sqrt{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 n + \Delta^2(k_z)}}. \quad (50)$$

Используя (2), получим

$$v_z = \frac{\partial \varepsilon_{n,k_z}}{\hbar \partial k_z} = \\ = -\frac{d}{2\hbar} \frac{\sqrt{4\Delta_S^2 \Delta_D^2 - (\varepsilon^2 - 2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 n - \Delta_S^2 - \Delta_D^2)^2}}{\varepsilon}. \quad (51)$$

Используя формулу Пуассона и суммируя по α , получим

$$I_0(\epsilon) = N_{LL} \frac{L}{2\pi d} \frac{d^2}{4\hbar^2} \int_{-\pi}^{\pi} dz \int_0^{\infty} dx \times \\ \times \frac{4\Delta_S^2 \Delta_D^2 - (\epsilon^2 - 2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x - \Delta_S^2 - \Delta_D^2)^2}{\epsilon} \times \\ \times 2\delta(\epsilon^2 - 2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x - \Delta^2(k_z)). \quad (52)$$

Интегрируя по z , находим

$$I_0(\epsilon) = N N_{LL} \frac{d^2 \Delta_S \Delta_D}{2\pi \hbar^2} \times \\ \times \int_{x_{min}}^{x_{max}} dx \sqrt{1 - \frac{(2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \epsilon^2)^2}{4\Delta_S^2 \Delta_D^2}}. \quad (53)$$

Переходя к новой переменной

$$\frac{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \epsilon^2}{2\Delta_S \Delta_D} = \cos y, \quad (54)$$

получаем

$$I_0(\epsilon) = N N_{LL} \frac{d^2 \Delta_S^2 \Delta_D^2}{4v_F^2 l_H^{-2} \hbar^4 \epsilon}. \quad (55)$$

Рассмотрим теперь осциллирующую часть

$$I_{osc}(\epsilon) = N N_{LL} \frac{d^2 \Delta_S \Delta_D}{\pi \hbar^2 \epsilon} \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_{x_{min}}^{x_{max}} dx \times$$

$$\times e^{2\pi i k x} \sqrt{1 - \frac{(2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \epsilon^2)^2}{4\Delta_S^2 \Delta_D^2}}. \quad (56)$$

Переходя к новой переменной

$$\frac{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2 x + \Delta_S^2 + \Delta_D^2 - \epsilon^2}{2\Delta_S \Delta_D} = \cos y, \quad (57)$$

получаем

$$I_{osc}(\epsilon) = \\ = N N_{LL} \frac{d^2 \Delta_S^2 \Delta_D^2}{\pi \epsilon v_F^2 l_H^{-2} \hbar^4} \times \\ \times \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left(2\pi i k \left(\frac{\epsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) \right) \times \\ \times \int_0^{\pi} \exp \left(2\pi i k \left(\frac{\Delta_S \Delta_D \cos y}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) \right) \sin^2 y dy. \quad (58)$$

Используя формулу

$$\int_0^{\pi} \exp \left(2\pi i k \left(\frac{\Delta_S \Delta_D \cos y}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) \right) \sin^2 y dy = \\ = \pi \left[J_0(a) + \frac{d^2 J_0(a)}{da^2} \right] = \frac{\pi}{a} J_1(a), \quad (59)$$

$$a = 2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2},$$

получаем

$$I_{osc}(\epsilon) = N N_{LL} \frac{d^2}{2\pi \hbar^2} \frac{\Delta_S \Delta_D}{\epsilon} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \cos \left(2\pi k \frac{\epsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) J_1 \left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right). \quad (60)$$

Итак,

$$I(\epsilon) = N N_{LL} \frac{d^2}{2\pi \hbar^2} \frac{\Delta_S \Delta_D}{\epsilon} \left[\frac{\pi \Delta_S \Delta_D}{2\hbar^2 l_H^{-2} v_F^2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \cos \left(2\pi k \frac{\epsilon^2 - \Delta_S^2 - \Delta_D^2}{2v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) J_1 \left(2\pi k \frac{\Delta_S \Delta_D}{v_F^2 l_H^{-2} \hbar^2} \right) \right]. \quad (61)$$

Приложение D.

Межслойная проводимость с недиагональным матричным элементом оператора скорости

Получим выражение для статической проводимости с помощью формулы Кубо

$$\sigma = - \lim_{\omega \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\omega} \operatorname{Im} P^R(\omega) \right). \quad (62)$$

Здесь

$$P^R(\omega) = P(q=0, \omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0} \quad (63)$$

— фурье-компонента запаздывающей двухвременной функции Грина, которая в представлении мнимых времен записывается в виде

$$P(q=0, \omega_n) = -\frac{1}{V} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\hbar \omega_n \tau} \langle T_{\tau} [J(\tau), J(0)] \rangle, \quad (64)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают гиббсовское усреднение и усреднение по примесям.

Выражая оператор тока свободных частиц через операторы вторичного квантования, получим

$$P^R(\omega_n) = \frac{e^2}{V} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2 \sigma_1 \sigma_2} V_{k_1 k_2} V_{k'_1 k'_2} \times \\ \times K_\omega^R(k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_1; k'_1 \sigma_2, k'_2 \sigma_2), \quad (65)$$

Здесь $K_{\omega_n}(k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_1; k'_1 \sigma_2, k'_2 \sigma_2)$ — фурье-образ двухчастичной функции Грина

$$K_\tau(1, 2; 1', 2') = -\langle T_\tau [\bar{a}_1(\tau) a_2(\tau) \bar{a}_{1'}(0) a_{2'}(0)] \rangle, \quad (66)$$

где $1 = k_1, \sigma_1$. В первом приближении величину $P^R(\omega_n)$ можно представить с помощью диаграммы, приведенной на рис. 3. Тогда получаем

$$P^R(\omega_n) = \frac{2e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \times \\ \times \int_0^\beta d\tau e^{i\hbar\omega_n \tau} G(k_1, -\tau) G(k_2, \tau), \quad (67)$$

где мы учли равенство

$$G_{12}(\tau) = \delta_{12} G(k_1, \tau),$$

справедливое при усреднении по примесям. Функция $G(k_1, \tau)$ получена при разложении по всем несвязанным диаграммам по примесному потенциалу.

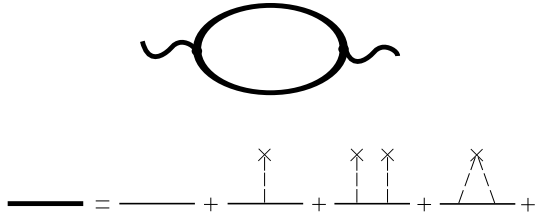


Рис. 3. Диаграммное представление величины $P^R(\omega_n)$

Стандартное разложение функций Грина в ряд Фурье дает

$$P^R(\omega_n) = \frac{2e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \times \\ \times \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G(k_1, \zeta_s) G(k_2, \zeta_s - \hbar\omega_n), \quad (68)$$

что позволяет рассчитать сумму

$$\frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G(k, \zeta_s) G(k, \zeta_s - \hbar\omega_n).$$

Для этого вычислим

$$S_{12}(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G_1(\zeta_s) G_2(\zeta_s - \hbar\omega_n), \quad (69)$$

где индексы соответствуют импульсам. Рассмотрим интеграл в комплексной плоскости

$$I_{12}(\omega_n) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) G_1(z) G_2(z - i\hbar\omega_n), \quad (70)$$

где контур C охватывает все полюса функции распределения $f(z)$, т.е. точки $z_s = i\zeta_s$, а функции $G_{1,2}(z)$ это аналитические продолжения функций Грина с дискретных точек $z_s = i\zeta_s$ на всю комплексную плоскость. Тогда по теореме о вычетах имеем

$$I_{12}(\omega_n) = -S_{12}(\omega_n). \quad (71)$$

С другой стороны, мы можем изменить контур, учитывая особенности функций Грина G_1, G_2 . Изучим эти особенности.

Функцию Грина $G(z)$ можно представить через спектральную плотность в виде

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho_k(\varepsilon)}{z - \varepsilon}. \quad (72)$$

Этот интеграл представляет собой интеграл Коши, причем контур проходит по действительной оси. Следовательно, действительная ось является особенностью, на которой функция Грина не является аналитической. Причем по обе стороны от этой оси аналитическими являются функции $G^R(z)$ — в верхней полуплоскости и $G^A(z)$ — в нижней полуплоскости. Аналогично, для функции $G_2(z - i\hbar\omega_n)$ такой особенностью является прямая $\text{Im} z - \hbar\omega_n = 0$. Эти особенности должны быть исключены из комплексной плоскости разрезами, путем изменения соответствующим образом контура интегрирования.

Поскольку $G(z) \sim z^{-1}$ при $z \rightarrow \infty$, соответствующие вклады от участков окружности исчезают и интеграл определяется только берегами разрезов. Тогда

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\infty+i\hbar\omega_n}^{-\infty+i\hbar\omega_n} d\varepsilon' f(\varepsilon') G_1^R(\varepsilon') G_2^A(\varepsilon' - i\hbar\omega_n) + \\ + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty+i\hbar\omega_n}^{\infty+i\hbar\omega_n} d\varepsilon' f(\varepsilon') G_1^R(\varepsilon') G_2^R(\varepsilon' - i\hbar\omega_n) = \\ = \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty}^{-\infty} d\varepsilon f(\varepsilon + i\hbar\omega_n) G_1^R(\varepsilon + i\hbar\omega_n) G_2^A(\varepsilon) +$$

$$+ \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon + i\hbar\omega_n) G_1^R(\varepsilon + i\hbar\omega_n) G_2^R(\varepsilon). \quad (73)$$

Учитывая, что $f(\varepsilon + i\hbar\omega_n) = f(\varepsilon)$, получаем

$$\begin{aligned} S_{12}(\omega_n) &= \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) [G_1^R(\varepsilon) - G_1^A(\varepsilon)] G_2^A(\varepsilon - i\hbar\omega_n) - \\ &- \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_1^R(\varepsilon + i\hbar\omega_n) [G_2^R(\varepsilon) - G_2^A(\varepsilon)]. \end{aligned} \quad (74)$$

Аналитическое продолжение в верхнюю полуплоскость дает

$$\begin{aligned} S_{12}(\omega) &= \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) [G_{k_1}^R(\varepsilon) - G_{k_1}^A(\varepsilon)] G_{k_2}^A(\varepsilon - \hbar\omega) - \\ &- \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_{k_1}^R(\varepsilon + \hbar\omega) [G_{k_2}^R(\varepsilon) - G_{k_2}^A(\varepsilon)]. \end{aligned} \quad (75)$$

Учитывая выражение для спектральной плотности

$$-2\pi i A_1(\varepsilon) = G_1^R(\varepsilon) - G_1^A(\varepsilon) \quad (76)$$

и опуская индексы, подставим эту функцию в аналитическое продолжение $P_{(1)}^R(\omega)$:

$$\begin{aligned} P^R(\omega) &= \frac{2e^2}{3V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} S_{12}(\omega) = \frac{2e^2}{3V} \sum_{k_1 k_2} \times \\ &\times \left[V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_1}(\varepsilon) G_{k_2}^A(\varepsilon - \hbar\omega) + \right. \\ &\left. + V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon) G_{k_1}^R(\varepsilon + \hbar\omega) \right]. \end{aligned} \quad (77)$$

Меня обозначения $k_1 \Rightarrow k_2$ во втором слагаемом в этом выражении, находим

$$\begin{aligned} P^R(\omega) &= \frac{2e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_1}(\varepsilon) [G_{k_2}^A(\varepsilon - \hbar\omega) + G_{k_2}^R(\varepsilon + \hbar\omega)]. \end{aligned} \quad (78)$$

Для мнимой части получаем

$$\begin{aligned} \text{Im} P^R(\omega) &= \left[\frac{2e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \right]^{-1} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_1}(\varepsilon) \text{Im} [G_{k_2}^R(\varepsilon + \hbar\omega) + G_{k_2}^A(\varepsilon - \hbar\omega)] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_1}(\varepsilon) [A_{k_2}(\varepsilon + \hbar\omega) - A_{k_2}(\varepsilon - \hbar\omega)] = \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) A_{k_1}(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon + \hbar\omega) + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon + \hbar\omega) A_{k_1}(\varepsilon + \hbar\omega) A_{k_2}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (79)$$

Переобозначая во втором слагаемом $k_1 \Rightarrow k_2$, получим

$$\begin{aligned} \text{Im} P^R(\omega) &= -\frac{2\pi e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon) - f(\varepsilon + \hbar\omega)] A_{k_1}(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon + \hbar\omega). \end{aligned} \quad (80)$$

Итак,

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{2\pi\hbar e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) A_{k_1}(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (81)$$

Для межслойной проводимости, соответственно, получаем

$$\sigma_{zz} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \Sigma_{zz}(\varepsilon), \quad (82)$$

где

$$\Sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar e^2}{V} \sum_{k_1 k_2} V_{k_1 k_2}^z V_{k_2 k_1}^z A_{k_1}(\varepsilon) A_{k_2}(\varepsilon). \quad (83)$$

В случае диагональных матричных элементов скоростей получаем выражение

$$\Sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar e^2}{V} \sum_k |V_k^z|^2 A_k^2(\varepsilon). \quad (84)$$

В случае малого числа примесей n_i можно показать, что

$$\lim_{n_i \rightarrow 0} A_k^2(\varepsilon) \approx \frac{\delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{2\pi} \tau(\varepsilon),$$

и мы приходим к формуле (14).

ЛИТЕРАТУРА

1. М. В. Карцовник, П. А. Кононович, В. Н. Лаухин, И. Ф. Щеголев, Письма в ЖЭТФ **48**, 498 (1988) [Sov. Phys. JETP Lett. **48**, 541 (1988)].
2. М. В. Карцовник, П. А. Кононович, В. Н. Лаухин, С. И. Песоцкий, И. Ф. Щеголев, ЖЭТФ **97**, 1 305 (1990) [JETP **70**, 735 (1990)].
3. M. V. Kartsovnik et al., J. Phys. I France **2**, 89 (1992)
4. J. Wosnitza et al., Synth. Metals **85**, 1479 (1997).
5. E. Ohmichi et al., Phys. Rev. B **57**, 7481 (1998).
6. P. D. Grigoriev, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher, N. D. Kushch, and P. Wyder, Phys. Rev. B **65**, 060403(R) (2002).
7. J. Wosnitza, *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1996).
8. T. Ishiguro, K. Yamaji and G. Saito, *Organic Superconductors*, 2nd Edition, Springer-Verlag, Berlin (1998).
9. *The Physics of Organic Superconductors and Conductors*, ed. by A. G. Lebed, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2008).
10. M. V. Kartsovnik, Chem. Rev. **104**, 5737 (2004).
11. M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher, N. D. Kushch, and P. Wyder, Phys. Rev. Lett. **89**, 126802 (2002).
12. P. D. Grigoriev, M. V. Kartsovnik, and W. Biberacher, Phys. Rev. B **86**, 165125 (2012).
13. N. Tajima, T. Yamauchi, T. Yamaguchi, M. Suda, Y. Kawasugi, H. M. Yamamoto, R. Kato, Y. Nishio and K. Kajita, Phys. Rev. B **88**, 075315 (2013).
14. E. Tisserond et al., Europhys. Lett. **119**, 67001 (2017).
15. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J.-B. Bonnemaïson, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and L. Taillefer, Nature **447**, 565 (2007).
16. S. E. Sebastian, N. Harrison, E. Palm, T. P. Murphy, C. H. Mielke, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and G. G. Lonzarich, Nature (London) **454**, 200 (2008)
17. S. E. Sebastian and C. Proust, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **6**, 411 (2015).
18. S. E. Sebastian, N. Harrison, and G. G. Lonzarich, Rep. Prog. Phys. **75**, 102501 (2012).
19. B. Vignolle, D. Vignolles, M.-H. Julien, and C. Proust, C. R. Phys. **14**, 39 (2013).
20. S. E. Sebastian, N. Harrison, P. A. Goddard, M. M. Altarawneh, C. H. Mielke, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, O. K. Andersen, and G. G. Lonzarich, Phys. Rev. B **81**, 214524 (2010).
21. E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke, N. Harrison, F. F. Balakirev, B. Dabrowski, and J. R. Cooper, Phys. Rev. Lett. **100**, 047003 (2008).
22. B. S. Tan, N. Harrison, Z. Zhu, F. Balakirev, B. J. Ramshaw, A. Srivastava, S. A. Sabok-Sayr, B. Dabrowski, G. G. Lonzarich, and S. E. Sebastian, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **112**, 9568 (2015).
23. T. Helm, M. V. Kartsovnik, M. Bartkowiak, N. Bittner, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza, and R. Gross, Phys. Rev. Lett. **103**, 157002 (2009).
24. T. Helm, M. V. Kartsovnik, C. Proust, B. Vignolle, C. Putzke, E. Kampert, I. Sheikin, E.-S. Choi, J. S. Brooks, N. Bittner, W. Biberacher, A. Erb, J. Wosnitza, and R. Gross, Phys. Rev. B **92**, 094501 (2015).
25. T. Terashima, N. Kurita, M. Tomita, K. Kihou, C.-H. Lee, Y. Tomioka, T. Ito, A. Iyo, H. Eisaki, T. Liang, M. Nakajima, S. Ishida, S.-I. Uchida, H. Harima, and S. Uji, Phys. Rev. Lett. **107**, 176402 (2011).
26. A. I. Coldea, D. Braithwaite, and A. Carrington, C. R. Phys. **14**, 94 (2013).
27. T. Terashima, N. Kikugawa, A. Kiswandhi, E.-S. Choi, J. S. Brooks, S. Kasahara, T. Watashige, H. Ikeda, T. Shibauchi, Y. Matsuda, T. Wolf, A. E. Böhmer, F. Hardy, C. Meingast, H. v. Löhneysen, M.-T. Suzuki, R. Arita, and S. Uji, Phys. Rev. B **90**, 144517 (2014).
28. *Superlattices and Other Heterostructures*, by E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, Springer Berlin, Heidelberg (1997); <https://doi.org/10.1007/978-3-642-60650-2>.
29. K. Enomoto, S. Uji, T. Yamaguchi, T. Terashima, T. Konoike, M. Nishimura, T. Enoki, M. Suzuki, and I. S. Suzuki, Phys. Rev. B **73**, 045115 (2006).

30. Lei et al., *Sci. Adv.* **6**, 6407 (2020).
31. P. D. Grigoriev, A. A. Sinchenko, P. Lejay, A. Hadj-Azzem, J. Balay, O. Leynaud, V. N. Zverev, and P. Monceau, *Eur. Phys. J. B* **89**, 151 (2016).
32. В. М. Гвозди́ков, ФТТ **26**, 2574 (1984) [*Sov. Phys. Solid State* **26**(9), 1560 (1984)].
33. T. Maniv and I. D. Vagner, *Phys. Rev. B* **38**, 6301 (1988).
34. P. Grigoriev, I. Vagner, Письма в ЖЭТФ, **69**, 139 (1999) [*JETP Lett* **69**, 156 (1999)].
35. P. Moses and R. H. McKenzie, *Phys. Rev. B* **60**, 7998 (1999).
36. T. Champel and V. P. Mineev, *Philos. Mag. B* **81**, 55 (2001).
37. P. D. Grigoriev, ЖЭТФ **119**, 1257 (2001) [*JETP* **92**, 1090 (2001)].
38. T. Champel, *Phys. Rev. B* **64**, 054407 (2001).
39. T. Champel and V. P. Mineev, *Phys. Rev. B* **66**, 195111 (2002).
40. P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **67**, 144401 (2003).
41. V. M. Gvozdkov, Yu. V. Pershin, E. Steep, A. G. M. Jansen, and P. Wyder, *Phys. Rev. B* **65**, 165102 (2002).
42. C. Bergemann, S. R. Julian, A. P. Mackenzie, S. Nishizaki, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2662 (2000).
43. P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **81**, 205122 (2010).
44. P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **83**, 245129 (2011).
45. P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **88**, 054415 (2013).
46. P. D. Grigoriev and T. I. Mogilyuk, *Phys. Rev. B* **90**, 115138 (2014).
47. P. D. Grigoriev and T. I. Mogilyuk, *Phys. Rev. B* **95**, 195130 (2017).
48. P. D. Grigoriev and T. Ziman, *Phys. Rev. B* **96**, 165110 (2017).
49. T. I. Mogilyuk and P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **98**, 045118 (2018).
50. A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals*, North Holland, Amsterdam (1988).
51. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University, Cambridge, England, (1972).
52. D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge University, Cambridge, England, (1984).
53. Bodo Huckestein *Rev. Mod. Phys.* **67**, 357 (1995).
54. S. A. J. Wiegiers, M. Specht, L. P. Levy, M. Y. Simmons, D. A. Ritchie, A. Cavanna, B. Etienne, G. Martinez, and P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3238 (1997).
55. А. А. Быков, Письма в ЖЭТФ **88**, 70 (2008).
56. А. А. Быков, Д. В. Номоконов, А. В. Горан и др. Письма в ЖЭТФ **114**, 486 (2021).
57. G. M. Minkov, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, S. A. Dvoretzki, N. N. Mikhailov, V. A. Solov'ev, M. Yu. Chernov, S. V. Ivanov, and A. V. Germanenko *Phys. Rev. B* **101**, 245303 (2020).
58. A. A. Burkov and Leon Balents, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127205 (2011).
59. A. A. Zyuzin, Si Wu, and A. A. Burkov, *Phys. Rev. B* **85**, 165110 (2012).
60. G. Zhang et al., *Appl. Phys. Lett.* **95**, 053114 (2009).
61. H. Peng et al., *Nature Mater.* **9**, 225 (2009).
62. Y. Zhang et al., *Nature Phys.* **6**, 584 (2010).
63. W. Zhang, R. Yu, H.-J. Zhang, X. Dai, and Zh. Fang, *New J. Phys.*, **12**(6), 065013 (2010).
64. Ch.-X. Liu, X.-L. Qi, H. J. Zhang, X. Dai, Zh. Fang, and Sh.-Ch. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**(4), 045122 (2010).
65. J. Linder, T. Yokoyama, and A. Sudbø, *Phys. Rev. B* **80**, 205401 (2009).
66. C. Liu, H. Zhang, B. Yan, X. Qi, T. Frauenheim, X. Dai, Z. Fang, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **81**, 041307 (2010).
67. H. Lu, W. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S. Shen, *Phys. Rev. B* **81**, 115407 (2010).
68. J.-P. Xu, M.-X. Wang, Zh. L. Liu et al., *Phys. Rev. Lett.* **114**, 017001 (2015).
69. N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
70. З.З. Алисултанов, ЖЭТФ **152** 986 (2017) [*Z. Z. Alisultanov, JETP* **125**, 836 (2017)].
71. Z. Z. Alisultanov, *Sci. Rep.* **8**, 13707 (2018).

ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ДОПИРОВАННОМ МОТТ-ХАББАРДОВСКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Э. З. Кучинский ^{a*}, Н. А. Кулеева ^{a**}, М. В. Садовский ^{a***}, Д. И. Хомский ^{b****}

^a Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Екатеринбург, Россия

^b II Physikalisches Institut, Universität zu Köln,
50937, Köln, Germany

Поступила в редакцию 8 ноября 2022 г.,
после переработки 8 ноября 2022 г.
Принята к публикации 15 ноября 2022 г.

Проведен теоретический анализ эффекта Холла в допированном моттовском диэлектрике, рассматриваемом в качестве прототипа купратного сверхпроводника. Рассматривается стандартная модель Хаббарда в рамках DMFT-приближения. В качестве типичного рассматривается случай частичного заполнения (дырочное допирование) нижней хаббардовской зоны. Рассчитана зависимость коэффициента Холла и холловского числа от степени дырочного допирования и определено значение критической концентрации носителей, при которой происходит смена знака коэффициента Холла. Получена существенная зависимость параметров эффекта Холла от температуры. Качественно анализируется роль рассеяния на беспорядке. Проведено сравнение теоретических результатов с имеющимися экспериментами по концентрационной зависимости холловского числа в нормальном состоянии YBCO и Nd-LSCO, демонстрирующее вполне удовлетворительное согласие теории и эксперимента. Полученная картина концентрационной зависимости параметров эффекта Холла в рамках модели Хаббарда может быть альтернативой популярной модели квантовой критической точки.

DOI: 10.31857/S0044451023030136

EDN: QFDCRI

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение эффекта Холла в высокотемпературных сверхпроводниках ведется уже давно. Самые ранние эксперименты показали существенные зависимости параметров эффекта Холла от температуры и от степени допирования, качественно отличные от случая обычных металлов [1]. Полное теоретическое понимание эффекта Холла в купратах в настоящее время отсутствует.

В последние годы большой интерес вызывают экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (куп-

ратов), которое реализуется в очень сильных внешних магнитных полях [2–4]. Наблюдающиеся при этом аномалии эффекта Холла обычно связываются с реконструкцией поверхности Ферми, связанной с формированием (антиферромагнитной) псевдощели и с близостью к соответствующей квантовой критической точке [5].

С начала теоретического изучения купратов одной из основных является точка зрения о том, что эти системы являются сильно коррелированными и металлическое (в том числе сверхпроводящее) состояние в них реализуется в результате допирования исходной фазы моттовского диэлектрика, который в простейшем случае может быть описан в рамках модели Хаббарда. При этом имеется довольно мало работ, в которых в рамках этой модели проводилось бы систематическое исследование зависимости эффекта Холла от степени допирования и температуры [6].

Не до конца ясен даже ответ на классический вопрос о том, при какой степени допирования (концентрации носителей) происходит смена знака эффекта

* E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

** E-mail: strigina@iep.uran.ru

*** E-mail: sadovski@iep.uran.ru

**** E-mail: khomskii@ph2.uni-koeln.de

Холла? При малом дырочном допировании исходного диэлектрика, такого как La_2CuO_4 или YBCO он, очевидно, просто определяется концентрацией дырок δ . Но при какой степени допирования происходит смена знака коэффициента Холла, когда происходит переход от дырочной поверхности Ферми к электронной? Решение этого вопроса представляется важным и для общей теории транспортных явлений в сильно коррелированных системах. Данная работа, в основном, посвящена изучению именно этого вопроса.

2. ХОЛЛОВСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА

Весьма общим подходом к исследованию модели Хаббарда является динамическая теория среднего поля (DMFT) [6–8], которая дает точное описание системы в пределе бесконечномерного пространства (решетки с бесконечным числом ближайших соседей). Активно развиваются подходы, позволяющие выйти за рамки этого жесткого ограничения [9, 10], но они, как правило, сильно усложняют рассмотрение. В данной работе мы ограничимся рассмотрением эффекта Холла в рамках стандартного приближения DMFT. Целью работы является систематическое исследование концентрационной и температурной зависимости эффекта Холла при различных степенях допирования нижней хаббардовской зоны, и сравнение полученных результатов с экспериментом на YBCO и Nd-LSCO [3, 4]. Предварительные результаты были опубликованы в краткой статье [11].

В стандартной DMFT [6–8] собственно энергетическая часть одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{p}\varepsilon)$ является локальной, т. е. есть не зависящей от импульса. В условиях такой локальности и обычная, и холловская проводимости полностью определяются спектральной плотностью этой функции Грина:

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (1)$$

В частности, обычная (диагональная) статическая проводимость имеет вид [6]

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi e^2}{2\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 A^2(\mathbf{p}\varepsilon), \quad (2)$$

а холловская (недиагональная) проводимость определяется как

$$\sigma_{xy}^H = \frac{2\pi^2 e^3 a H}{3\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \times \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} A^3(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (3)$$

Здесь a — параметр решетки, $\varepsilon(\mathbf{p})$ — электронная дисперсия, $f(\varepsilon)$ — функция распределения Ферми, а H — напряженность магнитного поля вдоль оси z . Таким образом, коэффициент Холла

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}^H}{H \sigma_{xx}^2} \quad (4)$$

также полностью определяется спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$, которую мы далее будем находить в рамках DMFT [6–8]. Эффективная однопримесная модель Андерсона DMFT в данной работе решалась с помощью метода численной ренормгруппы (NRG) [12].

Далее мы рассматриваем две базовые модели затравочной электронной зоны. Модель с полуэллиптической плотностью состояний (DOS) (на элементарную ячейку и один спин), что является неплохим приближением для трехмерного случая:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2}, \quad (5)$$

где D — полуширина зоны проводимости. Мы полагаем затравочный электронный спектр изотропным. Для нахождения в такой модели производных по импульсу от электронного спектра, входящих в (2) и (3), мы будем следовать подходу, предложенному ранее в работе [13]. Технические детали соответствующего анализа вынесены в Приложение.

Для двумерных систем, имея в виду сравнение с экспериментальными данными для купратов, мы ограничимся результатами для обычной модели электронного спектра в приближении сильной связи:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)) - 4t' \cos(p_x a) \cos(p_y a). \quad (6)$$

В такой двумерной модели мы далее рассмотрим ряд случаев:

- (1) спектр с перескоком лишь на ближайших соседей ($t' = 0$) и полной электрон-дырочной симметрией;
- (2) спектр с $t'/t = -0.25$, качественно соответствующий электронной дисперсии в системах типа LSCO.

(3) спектр с $t'/t = -0.4$, качественно соответствующий ситуации, наблюдаемой в YBCO.

Ниже приводятся подробные результаты расчетов коэффициента Холла для всех этих моделей.

3. КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Проведем сначала простейший качественный анализ. Нетрудно понять, что глубоко в состоянии моттовского диэлектрика с хорошо определенными верхней и нижней хаббардовскими зонами при допировании дырками коэффициент Холла фактически определяется заполнением нижней хаббардовской зоны (верхняя находится существенно выше по энергии и практически не заполнена). В такой ситуации в модели с электрон-дырочной симметрией (в двумерном случае это соответствует спектру с $t' = 0$) оценка заполнения зоны, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, может быть получена из очень простых соображений. Будем рассматривать парамагнитную фазу $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n$, так что n далее обозначает плотность электронов на одну проекцию спина, а их полная плотность равна $2n$. Качественно ситуация иллюстрируется рис. 1. В нижней хаббардовской

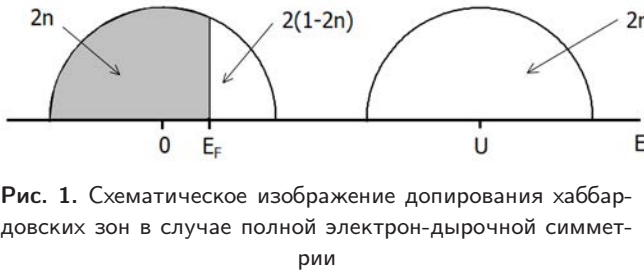


Рис. 1. Схематическое изображение допирования хаббардовских зон в случае полной электрон-дырочной симметрии

зоне (в окрестности энергии $E = 0$) $2n$ электронов занимают состояния ниже энергии Ферми E_F . При добавлении следующего электрона он может попасть в верхнюю хаббардовскую зону в окрестности $E \sim U$, где также имеется $2n$ состояний. Он также может попасть в нижнюю хаббардовскую зону, где еще остается $2(1 - 2n)$ пустых состояний в области $E > E_F$. В итоге имеем $2n + 2(1 - 2n) + 2n = 2$, как и должно быть. Знак коэффициента Холла изменится при половинном заполнении нижней зоны, когда $2n = 2(1 - 2n)$. Отсюда ясно, что значение критической концентрации $n_c = 1/3$.

Этот же результат легко получается и в приближении Хаббард I, где функция Грина для электро-

нов с проекцией спина «вверх» имеет вид [14]

$$G_{\uparrow}^R(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{1 - n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{+}(\mathbf{p}) + i\delta}. \quad (7)$$

где $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p})$ — спектр квазичастиц в верхней и нижней хаббардовских зонах. Видим, что в этом приближении число состояний с проекцией спина «вверх» в нижней хаббардовской зоне (первое слагаемое в (7)) действительно есть $1 - n_{\downarrow}$. При допировании дырками моттовского диэлектрика практически весь вклад в заполнение дает нижняя хаббардовская зона, поэтому

$$\begin{aligned} n &= n_{\uparrow} \approx \\ &\approx (1 - n_{\downarrow}) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} \right) \equiv \\ &\equiv (1 - n)n_0. \end{aligned} \quad (8)$$

Тогда при половинном заполнении нижней хаббардовской зоны $n_0 = 1/2$ происходит смена знака эффекта Холла (эффективной массы квазичастиц), так что снова получаем $n = n_c = 1/3$.

В общем случае ситуация конечно сложнее. В сильно коррелированных системах коэффициент Холла (и другие электронные свойства) оказываются существенно зависящими от температуры. При низкой температуре в таких системах в DMFT-приближении наряду с нижней и верхней хаббардовскими зонами вблизи уровня Ферми формируется узкая квазичастичная зона — квазичастичный пик

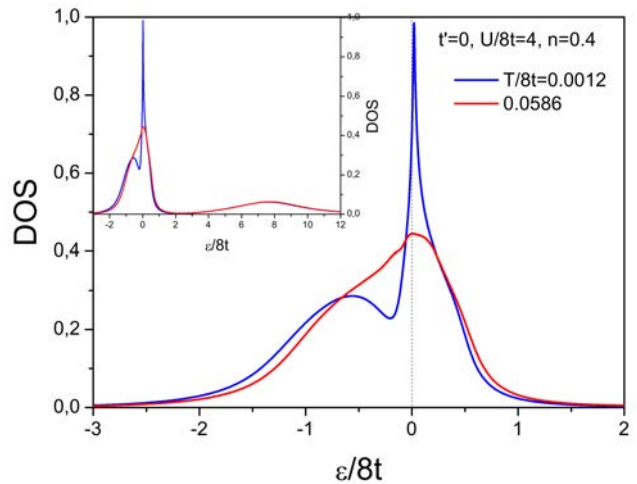


Рис. 2. Плотность состояний (DOS) в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах. Параметры модели Хаббарда приведены на рисунке, $8t$ — ширина исходной зоны. На вставке показана плотность состояний в широком интервале энергий, включающем верхнюю хаббардовскую зону

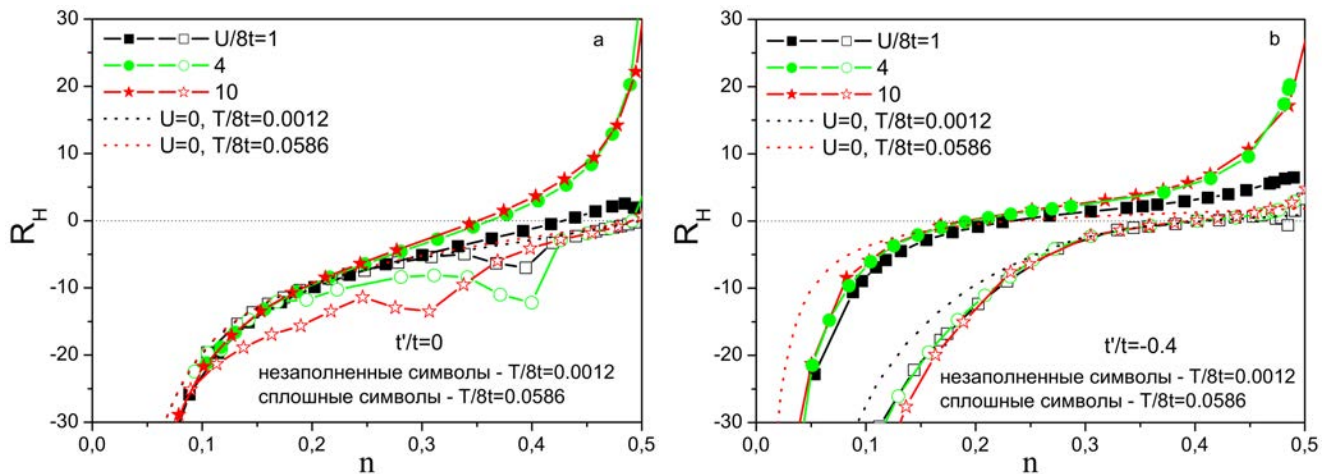


Рис. 3. Зависимость коэффициента Холла в случае $t' = 0a$ и $t'/t = -0.4b$ от степени заполнения зоны для различных значений силы электронных корреляций U в низкотемпературном режиме (незаполненные символы) и в высокотемпературном режиме (заполненные символы)

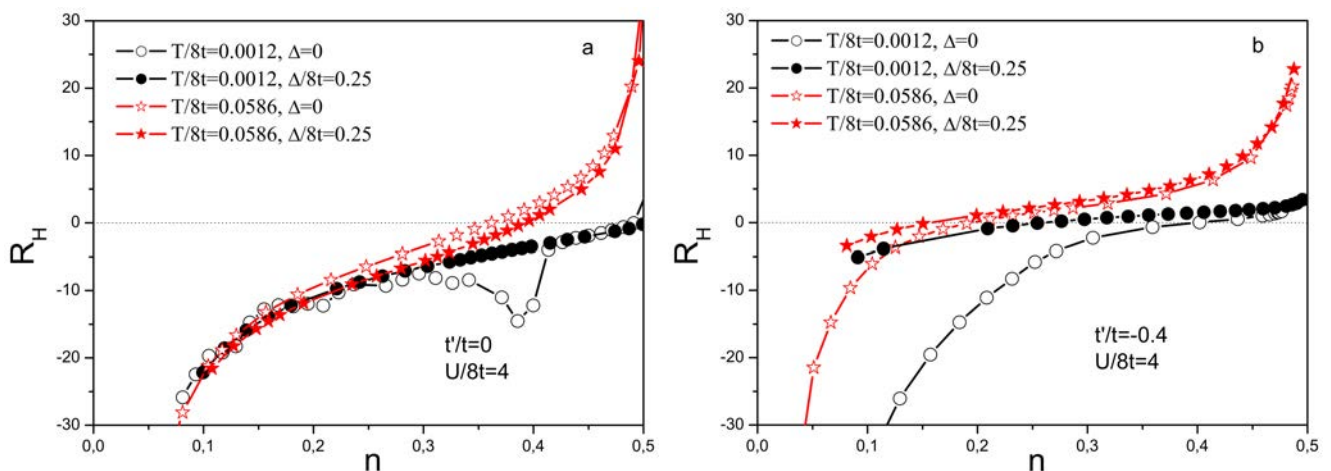


Рис. 4. Зависимость коэффициента Холла от степени заполнения зоны в присутствии примесного рассеяния ($\Delta/8t = 0.25$, заполненные символы) и в его отсутствии ($\Delta = 0$, незаполненные символы) для двух разных моделей двумерного электронного спектра: a — полной электрон-дырочной симметрии ($t' = 0$); b — $t'/t = -0.4$

в плотности состояний [6–8]. В допированном дырками моттовском диэлектрике (далее мы будем рассматривать именно дырочное допирование) такой пик лежит вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны (см. рис. 2). Поэтому при низкой температуре коэффициент Холла во многом определяется заполнением этой квазичастичной зоны. При достаточно высокой температуре (порядка или больше ширины квазичастичного пика) квазичастичный пик размывается и тогда коэффициент Холла полностью определяется заполнением нижней хаббардовской зоны. Таким образом, в общем случае, необходимо рассматривать два достаточно разных температурных режима для эффекта Холла.

В низкотемпературном режиме и ширина, и амплитуда квазичастичного пика зависят как от заполнения, так и от температуры. Рост температуры приводит к уширению квазичастичного пика и некоторому смещению уровня Ферми ниже максимума этого пика (см. рис. 2). Это может приводить к заметному уменьшению коэффициента Холла, однако дальнейший рост температуры, размывая квазичастичный пик, приводит к росту этого коэффициента. Существенная зависимость квазичастичного пика от заполнения зоны в низкотемпературном режиме приводит к областям немонотонной зависимости коэффициента Холла от степени заполнения (см. рис. 3a).

На рис. 3а видно, что высокотемпературное поведение коэффициента Холла в допированном моттовском диэлектрике ($U/2D = 4; 10$) в модели с полной электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) полностью подтверждает приведенную выше качественную оценку. Но при заметном нарушении электрон-дырочной симметрии эта оценка перестает работать (см. рис. 3б).

Необходимо отметить, что к размытию и исчезновению квазичастичного пика приводит не только рост температуры, но и разупорядочение [9, 13] (см. рис. 4), а также, например, псевдоцелевые флуктуации, которыми локальный подход DMFT полностью пренебрегает [9, 15]. Таким образом, область применимости приведенных выше простейших оценок в реальности оказывается заметно шире.

В общем случае расчет влияния рассеяния на беспорядке (тем более псевдоцелевых флуктуаций) на эффект Холла представляет собой очень сложную задачу. Для простых оценок ниже приводятся результаты расчетов по формулам (2), (3), (4), в которых просто использованы значения спектральной плотности $A(\mathbf{p}\varepsilon)$ для неупорядоченной модели Хаббарда, полученные в рамках DMFT+ Σ -подхода [9, 15]. Параметр беспорядка Δ обозначает эффективную частоту рассеяния электронов случайным полем (в самосогласованном борновском приближении). Ясно, что такой подход, основанный только на учете беспорядка в спектральной плотности, является слишком упрощенным, но он представляется разумным для качественного анализа.

На рис. 4 приведено сравнение зависимостей коэффициента Холла от степени заполнения зоны в отсутствие беспорядка и для рассеяния на примесях с $\Delta/8t = 0.25$ для случая моттовского диэлектрика с $U/8t = 4$. Видим, что для разных значений t' в высокотемпературном пределе беспорядок достаточно слабо влияет на коэффициент Холла, лишь очень незначительно смещая величину заполнения, при которой наблюдается смена знака R_H . В низкотемпературном режиме примесное рассеяние, размывая квазичастичный пик, приводит к исчезновению аномалий R_H , связанных с существованием такого пика (см. рис. 4а), и ослабляя различие между низкотемпературным и высокотемпературным режимами.

На рис. 5 приведены зависимости коэффициента Холла от степени заполнения зоны и температуры в случае моттовского диэлектрика с $U/8t = 4$ для различных моделей электронного спектра, как в случае полной электрон-дырочной симметрии $t' = 0$, так и при $t'/t = -0.25$ и $t'/t = -0.4$, характерных для

купратных систем LSCO и YBCO соответственно. На зависимости R_H от степени заполнения зоны с ростом температуры мы наблюдаем плавную эволюцию от низкотемпературного режима к высокотемпературному с плавным ослаблением аномалий коэффициента Холла, связанных с квазичастичными пиками, которые наиболее ярко видны на рис. 3а и рис. 5а. Для всех рассмотренных случаев электронного спектра ($t'/t = 0; -0.25; -0.4$) рост температуры приводит к смещению величины заполнения зоны, при которой $R_H = 0$, в область больших величин дырочных допирований. Также на рис. 5 б, d, f приведены температурные зависимости коэффициента Холла для различных степеней заполнения зоны. Во всех случаях наблюдается существенная зависимость R_H от температуры и при небольших значениях дырочных допирований ($n = 0.45-0.3$) R_H растет с ростом температуры и мы наблюдаем смену знака R_H при существенных величинах дырочных допирований ($n = 0.3-0.2$). В случае достаточно малых t' ($t'/t = 0; -0.25$) может наблюдаться немонокотонная зависимость коэффициента Холла от температуры, когда при низких температурах R_H уменьшается с ростом температуры, а при высоких T растет.

Смену знака коэффициента Холла обычно связывают с изменением типа носителей заряда. Кроме того, стремление к нулю коэффициента Холла приводит к расходимости холловского числа $n_H \sim 1/R_H$. На рис. 6 приведена зависимость степени заполнения, при котором в моттовском диэлектрике происходит смена знака коэффициента Холла, от температуры для всех трех рассматриваемых нами значений t'/t . Видим, что во всех моделях степень заполнения, при которой R_H меняет знак, уменьшается с ростом температуры. В случае полной электрон-дырочной симметрии $t' = 0$ мы видим, что в высокотемпературном режиме величина дырочного допирования $\delta = 1 - 2n$, при котором R_H меняет знак, действительно стремится к значению $1/3$. Однако с ростом $|t'/t|$ наблюдается заметное уменьшение величины дырочного допирования, при котором R_H меняет знак.

4. КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА В МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОЙ ЗОНЫ С ПОЛУЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ СОСТОЯНИЙ

Кратко рассмотрим результаты, полученные в модели электронной зоны с полуэллиптической плотностью состояний, которая обладает полной электрон-дырочной симметрией. Основные ре-

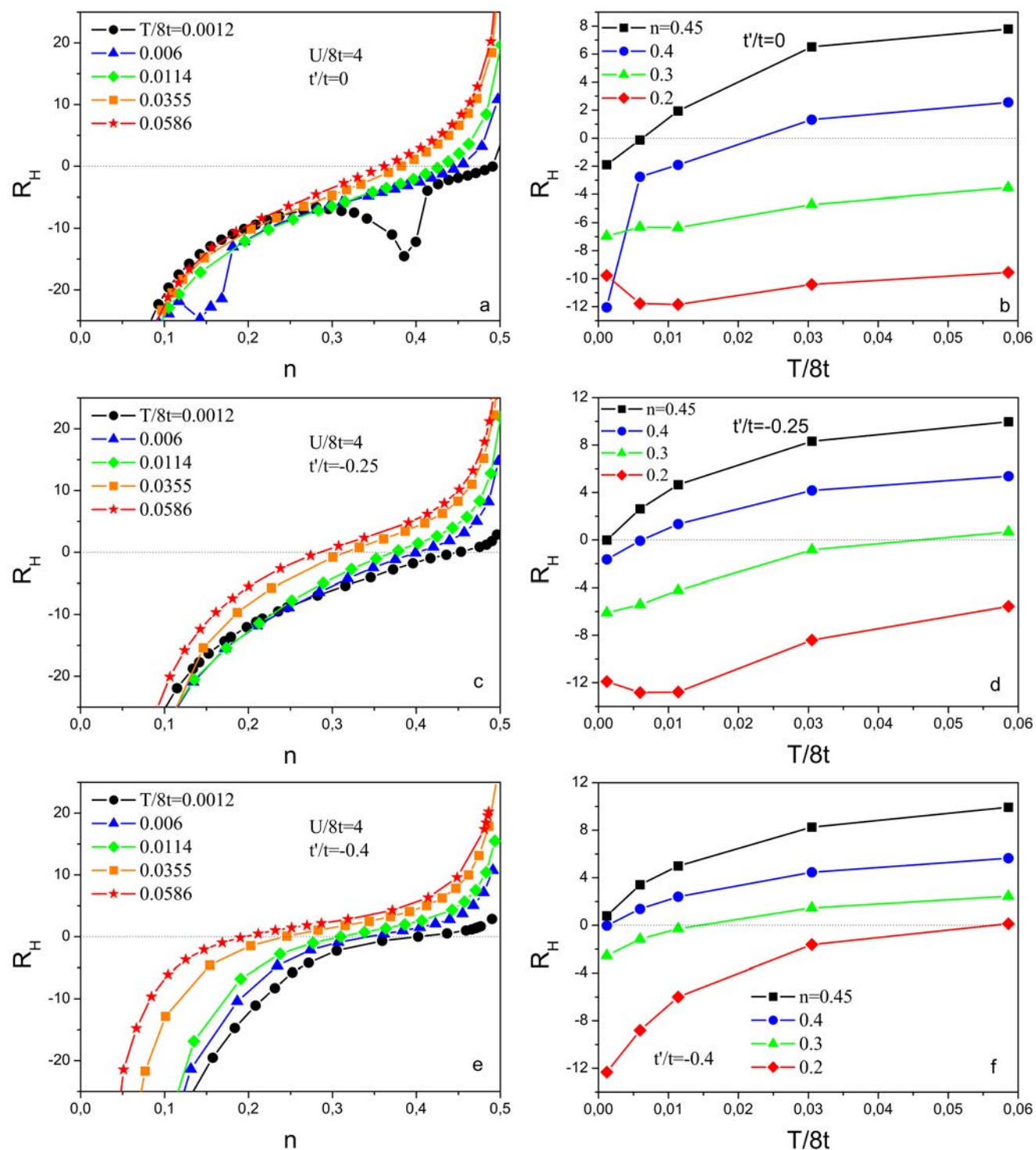


Рис. 5. Зависимость коэффициента Холла от степени заполнения зоны для различных значений температуры (a, c, e) и температурная зависимость R_H для разных значений заполнения зоны (b, d, f)

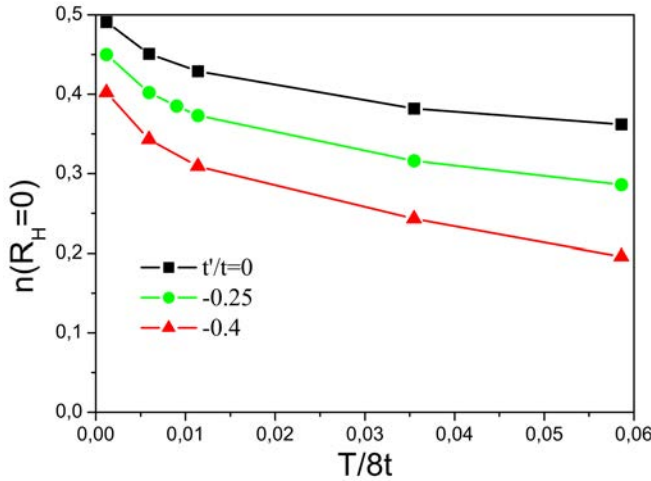


Рис. 6. Зависимость степени заполнения, при котором в моттовском диэлектрике происходит смена знака коэффициента Холла, от температуры для трех различных значений t'/t

результаты оказываются качественно аналогичными результатам для рассмотренной выше двумерной модели электронного спектра с сильной связью с $t' = 0$, которая тоже обладает полной электрон-дырочной симметрией. Аналогично двумерному случаю коэффициент Холла в трехмерной модели в сильно коррелированной системе существенно зависит от температуры, и необходимо отдельно рассматривать низкотемпературный и высокотемпературный режимы для R_H , поскольку в низкотемпературном режиме коэффициент Холла во многом определяется заполнением квазичастичной зоны (квазичастичного пика).

Рост температуры приводит к размытию квазичастичного пика (см. рис. 7), и в высокотемпературном режиме коэффициент Холла в основном определяется заполнением нижней (для рассматриваемого нами случая дырочного допирования) хаббардовской зоны.

На рис. 8а приведена зависимость коэффициента Холла от заполнения электронной зоны в низкотемпературном (незаполненные символы) и в высокотемпературном (сплошные символы) режимах как для случая сильно коррелированного металла ($U/2D = 1$), так и допированного моттовского диэлектрика ($U/2D = 4; 10$). Видим, что в низкотемпературном режиме, как и в двумерной модели с $t' = 0$ (R_H практически при всех заполнениях зоны отрицателен), при небольших величинах дырочного допирования наблюдается существенная немонотонность в зависимости R_H от уровня допирования.

В высокотемпературном режиме коэффициент Холла при малой величине дырочного допирования

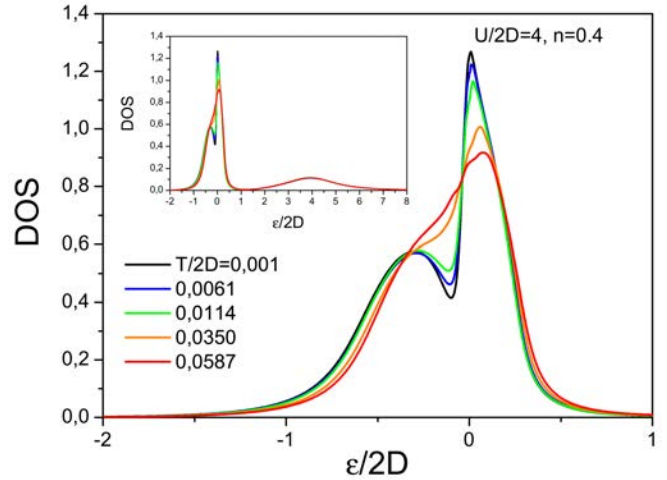


Рис. 7. Плотность состояний (DOS) в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах для модели с полуэллиптической зоной (трехмерный случай)

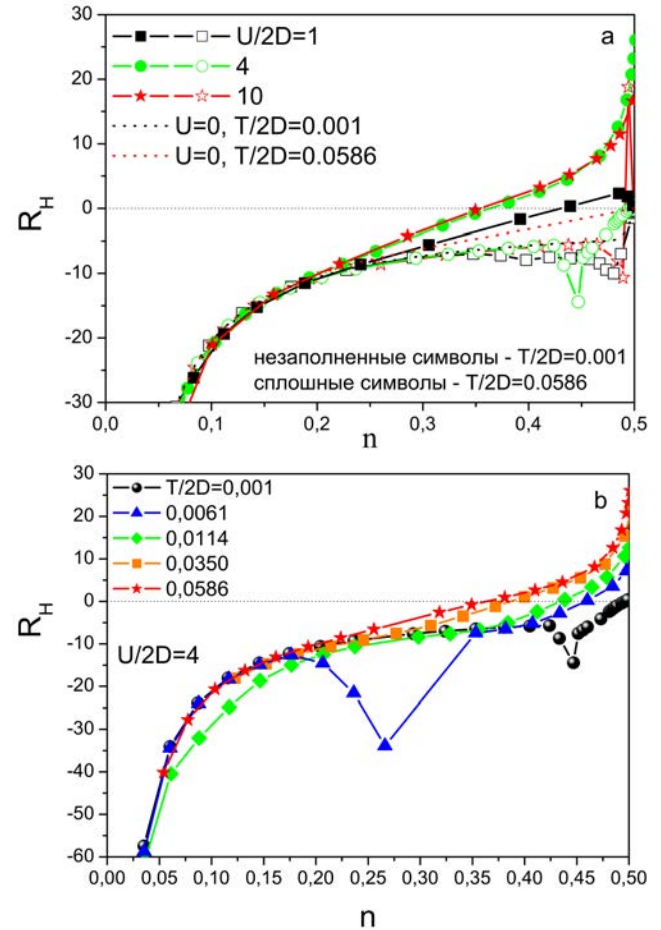


Рис. 8. Зависимость коэффициента Холла от заполнения в модели электронной зоны с полуэллиптической плотностью состояний: а — для различных значений U в низкотемпературном (незаполненные символы) и в высокотемпературном режиме (сплошные символы); б — для различных значений температуры при фиксированном значении $U/2D = 4$

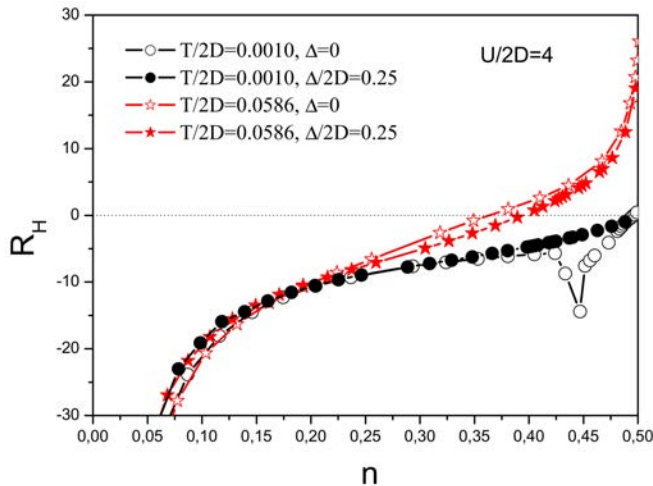


Рис. 9. Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны в низкотемпературном режиме (черные кривые) и высокотемпературном режиме (красные кривые) в отсутствии беспорядка $\Delta = 0$ (незаполненные символы) и при $\Delta/2D = 0.25$ (сплошные символы)

оказывается положительным (дырочным), уменьшаясь с ростом уровня дырочного допирования и при большом уровне допирования R_H становится отрицательным, изменяя знак (в моттовском диэлектрике) при $\delta = 1 - 2n \approx 1/3$, что снова подтверждает приведенные выше качественные оценки. Плавная эволюция зависимости коэффициента Холла от степени заполнения при росте температуры от низкотемпературного предела до высокотемпературного в моттовском диэлектрике ($U/2D = 4$) приведена на рис. 8b.

На рис. 9 продемонстрировано влияние беспорядка на коэффициент Холла в моттовском диэлектрике. В высокотемпературном пределе примесное рассеяние практически не влияет на R_H , а в низкотемпературном пределе беспорядок, размывая квазиэлектронный пик, устраняет аномальную немонотонность в зависимости R_H от n .

5. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Как уже упоминалось выше, в последние годы были проведены уникальные экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (купратов), которое было реализовано в очень сильных внешних магнитных полях [2–4]. При этом была получена зависимость холловского числа $n_H = a^2/|eR_H|$ от степени допирования. Наблюдался постепенный переход от линейной зависимости от концентрации дырок пропорциональной δ в области малой их концентрации к значе-

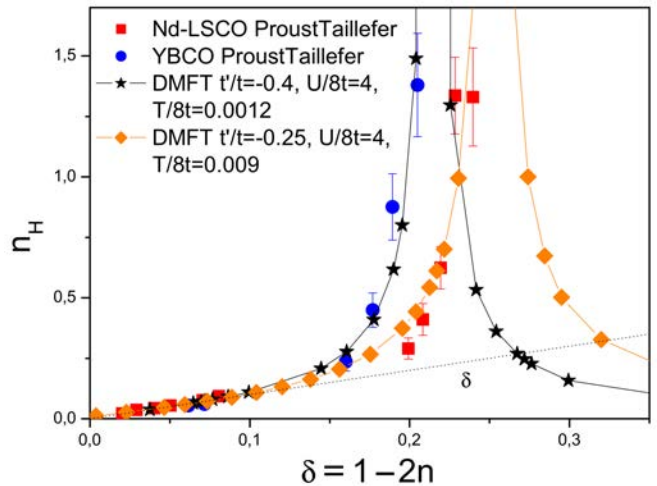


Рис. 10. Зависимость холловского числа n_H от степени допирования — сравнение с экспериментами [3, 4] для YBCO и Nd-LSCO, $\delta = 1 - 2n$ — концентрация дырок. Звездочки и ромбики — результаты наших расчетов, синие кружочки и красные квадраты — эксперимент

ниям пропорциональным $(1 + \delta)$ в области достаточно больших концентраций порядка критической концентрации дырок, при которой происходит исчезновение (заккрытие) псевдощели. Эти данные, в основном, интерпретируются в рамках картины реконструкции поверхности Ферми вблизи предполагаемой квантовой критической точки в рамках достаточно специфической модели купратов с неоднородной локализацией носителей [5, 16]. Нужно заметить, что ни в одной из известных нам работ экспериментальные точки, надежно демонстрирующие зависимость, пропорциональную $(1 + \delta)$, отсутствуют, а надежным экспериментальным фактом является только наблюдаемый рост холловского числа.

Ниже предлагается альтернативная интерпретация роста холловского числа в этих экспериментах, как связанного с приближением к критической концентрации носителей, при которой меняется знак величины эффекта Холла (коэффициент Холла R_H обращается в нуль) [11].

На рис. 10 показано сравнение результатов наших расчетов для холловского числа (холловской концентрации) $n_H = a^2/|eR_H|$ для типичных значений параметров модели с экспериментальными данными по YBCO и Nd-LSCO из работ [3, 4]. Видим, что даже при этом, достаточно произвольном, выборе параметров мы можем получить практически количественное согласие с экспериментом без всяких предположений о связи эффекта Холла с реконструкцией поверхности Ферми псевдощелью и близостью к соответствующей квантовой критической точке, которые использовались в работах [3–5, 16].

Таким образом, оказывается, что интерпретация эффекта Холла в купратах на основе картины допирования нижней халльбардовской зоны моттовского диэлектрика может оказаться достаточно разумной альтернативой картине, основанной на близости к квантовой критической точке.

С этой точки зрения, было бы крайне интересно более детально изучить эффект Холла в окрестности критической концентрации, соответствующей смене знака коэффициента Холла (расходимости холловского числа). Для этого требуется исследовать системы (купраты), в которых такая смена знака реально достигается при изменении степени допирования.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали поведение коэффициента Холла в металлической фазе, возникающей при допировании моттовского диэлектрика. Основное внимание мы уделили случаю дырочного допирования, характерного для большей части купратов. Был рассмотрен ряд двумерных моделей сильной связи для электронного спектра, подходящих для описания электронной структуры в купратах, а также и трехмерная модель с полуэллиптической затравочной плотностью состояний. Во всех моделях коэффициент Холла R_H в допированном моттовском диэлектрике существенно зависит от температуры. В низкотемпературном пределе R_H во многом определяется заполнением квазичастичного пика, что может приводить к заметной немонотонности в зависимости коэффициента Холла от степени допирования. В высокотемпературном пределе, когда квазичастичный пик существенно подавлен, R_H в основном определяется заполнением нижней (при дырочном допировании) или верхней (при электронном допировании) халльбардовской зоны. В этом пределе смена знака эффекта Холла и соответствующая ей расходимость холловского числа происходит в простейшем (симметричном) случае вблизи величины заполнения зоны $n = 1/3$ в расчете на одну проекцию спина или $2/3$ для полной плотности электронов, что соответствует дырочному допированию $\delta = 1 - 2n = 1/3$, но в общем случае это заполнение достаточно сильно зависит от выбора параметров модели. Эта концентрация возникает из простых качественных оценок и не связана с более сложными факторами, такими как изменение топологии поверхности Ферми или с наличием квантовых критических точек.

Вполне удовлетворительное согласие полученных концентрационных зависимостей холловского числа с экспериментами на YBCO и Nd-LSCO [3, 4] показывает, что рассмотренная нами модель может быть достаточно разумной альтернативой картине эффекта Холла в окрестности квантовой критической точки, связанной с закрытием псевдощели [5, 16].

Финансирование. Работа Э.З.К., Н.А.К. и М.В.С. выполнялась при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00011). Работа Д.И.Х. поддержана грантом DFG по проекту № 277146847 — CRC 1238.

ПРИЛОЖЕНИЕ

«Затравочная» электронная дисперсия и ее производные для зоны с полуэллиптической плотностью состояний

Будем считать электронный спектр, отвечающий плотности состояний (5) изотропным $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(|\mathbf{p}|) \equiv \varepsilon(p)$. Для нахождения проводимостей (2) и (3) необходимо провести усреднение «по углам» производных по компонентам импульса, имеющихся в этих выражениях,

$$\left\langle \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \right\rangle_{\Omega} = \varepsilon'^2(p) \left\langle \frac{p_x^2}{p^2} \right\rangle_{\Omega} = \frac{1}{d} \varepsilon'^2(p) = \frac{1}{3} \varepsilon'^2(p), \quad (9)$$

где

$$\langle \dots \rangle_{\Omega} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \dots$$

— усреднение по телесному углу в трехмерной ($d = 3$) системе, а

$$\varepsilon'(p) = \frac{d\varepsilon(p)}{dp}$$

— производная по модулю импульса

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} &= \\ &= \varepsilon'^2(p) \left[\varepsilon''(p) \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} + \frac{\varepsilon'(p)}{p} \frac{p_x^2 p^2 - p_x^2 p_y^2}{p^4} \right], \quad (10) \end{aligned}$$

где $\varepsilon''(p) = d^2 \varepsilon(p)/dp^2$. Поэтому возникает задача найти среднее по углам $\langle p_x^2 p_y^2 / p^4 \rangle_{\Omega}$. Введем обозначения:

$$\left\langle \frac{p_x^4}{p^4} \right\rangle_{\Omega} \equiv a \quad \text{и} \quad \left\langle \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} \equiv b.$$

С одной стороны:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \\ &= \left\langle \frac{(p_x^4 + p_y^4 + p_z^4) + 2p_x^2 p_y^2 + 2p_x^2 p_z^2 + 2p_y^2 p_z^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = \\ &= d \left\langle \frac{p_x^4}{p^4} \right\rangle_{\Omega} + d(d-1) \left\langle \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = 3a + 6b = 1. \end{aligned} \quad (11)$$

С другой стороны:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \left\langle \frac{p_x^4 + p_y^4 + 2p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = \\ &= 2a + 2b = \frac{8}{15}. \end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \langle \sin^4 \theta \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta \sin^4 \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1 - \tau^2)^2 d\tau = \frac{8}{15}, \end{aligned} \quad (13)$$

где θ — угол между вектором $\mathbf{p}$ и осью z , из системы уравнений (11), (12) сразу находим $a = \langle p_x^4/p^4 \rangle_{\Omega} = 1/5$ и $b = \langle p_x^2 p_y^2/p^4 \rangle_{\Omega} = 1/15$, так что получаем

$$\left\langle \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} \right\rangle_{\Omega} = \frac{\varepsilon'^2(p)}{15} \left[\varepsilon''(p) + \frac{4\varepsilon'(p)}{p} \right]. \quad (14)$$

Для нахождения производных $\varepsilon'(p)$, $\varepsilon''(p)$ для спектра, определяемого полуэллиптической плотностью состояний (5), можно воспользоваться подходом, развитым в [13]. Приравнивая число состояний в элементе фазового объема $d^3 p$ числу состояний в области энергий $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$, получаем дифференциальное уравнение для определения $\varepsilon(p)$:

$$\frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi)^3} = N_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (15)$$

Предполагая квадратичность закона дисперсии $\varepsilon(p)$ вблизи нижнего края зоны, получаем начальное условие к (15): $p \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow -D$. В результате:

$$p = \left[6\pi \left(\pi - \varphi + \frac{1}{2} \sin(2\varphi) \right) \right]^{1/3}, \quad (16)$$

где $\varphi = \arccos(\varepsilon/D)$, а импульс дан в единицах обратного параметра решетки. Данное выражение

неявным образом определяет закон дисперсии $\varepsilon(p)$ на электронном участке спектра $\varepsilon \in [-D, 0]$.

Можно определить характерный импульс p_0 , соответствующий $\varepsilon = 0$:

$$p_0 = p(\varepsilon = 0) = (3\pi^2)^{1/3}. \quad (17)$$

Нас интересуют первые две производные по импульсу от такого спектра. Из (15) получаем

$$\varepsilon'(p) = \frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{p^2}{2\pi^2 N_0(\varepsilon)}, \quad (18)$$

где p определяется выражением (16).

$$\begin{aligned} \varepsilon''(p) &= \frac{d}{dp} \frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2p N_0(\varepsilon) - p^2 \frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dp}}{N_0^2(\varepsilon)} = \\ &= \frac{1}{N_0(\varepsilon)} \left[\frac{p}{\pi^2} - \varepsilon'^2(p) \frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right], \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} = -\frac{2}{\pi D^2} \frac{\varepsilon}{\sqrt{D^2 - \varepsilon^2}},$$

$\varepsilon'(p)$ определяется (18), а p определяется выражением (16).

На дырочном участке спектра ($\varepsilon \in [0, D]$) для получения квадратичного закона дисперсии вблизи верхнего края зоны ($\varepsilon \rightarrow D$) вводим дырочный импульс $\tilde{p} = 2p_0 - p$ и приравниваем число состояний в элементе фазового объема $d^3 \tilde{p}$ и в энергетической полосе $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$:

$$\frac{4\pi \tilde{p}^2 d\tilde{p}}{(2\pi)^3} = -N_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (20)$$

Требуя $\tilde{p} \rightarrow 0$ на верхнем крае зоны $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем

$$\tilde{p} = \left[6\pi \left(\varphi - \frac{1}{2} \sin(2\varphi) \right) \right]^{1/3}. \quad (21)$$

Для скорости на дырочном участке спектра получаем

$$\varepsilon'(p) = -\frac{d\varepsilon}{d\tilde{p}} = \frac{\tilde{p}^2}{2\pi^2 N_0(\varepsilon)}. \quad (22)$$

Выражения (18), (22) определяют зависимость скорости $\varepsilon'(p)$ от энергии. Легко убедиться, что скорость оказывается четной по энергии и обращается в нуль на краях зоны. Вторая производная по импульсу в таком подходе явно определена на электронном участке спектра ($\varepsilon \in [-D, 0]$), на дырочном это сделать сложнее. Однако можно потребовать от модели полной электрон-дырочной симметрии, которая сводится к требованию четности по $\varepsilon(p)$ квадрата скорости, входящего в выражение (2) и нечетности (смена знака при изменении типа носителей

заряда) величины (14), входящей в выражение (3) для холловской проводимости. С учетом такой симметрии полученные в этом приложении выражения позволяют перейти в (2), (3) от суммирования по импульсам к интегрированию по энергии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Iye, J. Phys. Chem. Solids **53**, 1561 (1992).
2. F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G. S. Boebinger, Phys. Rev. Lett. **101**, 017004 (2009).
3. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, and C. Proust, Nature **531**, 210 (2016).
4. C. Collignon, S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, F. Laliberte, O. Cyr-Choiniere, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, Phys. Rev. B **95**, 224517 (2017).
5. C. Proust and L. Taillefer, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**, 409 (2019).
6. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).
7. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
8. D. Vollhardt in: *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, eds. A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceed. vol. 1297, AIP, Melville, New York (2010), p. 339; ArXiv: 1004.5069.
9. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Phys. Usp. **55**, 325 (2010)].
10. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held. Rev. Mod. Phys. **90**, 025003 (2018).
11. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, Д. И. Хомский, М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ **115**, 444 (2022) [JETP Lett. **115**, 402 (2022)].
12. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, Rev. Mod. Phys. **60**, 395 (2008).
13. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **133**, 670 (2008) [JETP **106**, 581 (2008)].
14. D. I. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press, NY (2010).
15. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **72**, 155105 (2005).
16. D. Pelc, P. Popčević, M. Požek, M. Greven, and N. Barišić, Sci. Adv. **5**, eaau4538 (2019).

МОДЕЛЬ ФРАКТАЛЬНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ХРОМАТИНА В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

С. В. Григорьев^{a,b}, О. Д. Шнырков^a, К. А. Пшеничный^a, П. М. Пустовойт^a,
Е. Г. Яшина^{a,b}*

^a *Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт»
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

^b *Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 25 марта 2022 г.,
после переработки 19 октября 2022 г.
Принята к публикации 29 октября 2022 г.

Хроматин, состоящий из метровой нити ДНК и сопутствующих белков, плотно, но без запутывания упакован в ядре биологической клетки. При этом существует гипотеза, подтверждаемая экспериментами с использованием технологии захвата конформации хроматина [1], что кривые, плотно заполняющие пространство (кривая Пеано или кривая Гильберта), являются хорошей теоретической моделью для описания укладки хроматина в ядре. Однако эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов демонстрируют бифрактальную организацию хроматина в интерфазном ядре, показывая наличие логарифмического фрактала на больших масштабах и объемного фрактала — на меньших [2]. В работе с помощью метода численного фурье-анализа в двумерном пространстве смоделирован процесс рассеяния нейтронов и представлена модель единого бифрактального объекта. Показано, что в численных экспериментах по рассеянию излучения в двумерном пространстве массовые и логарифмические фракталы существенно отличаются от кривых, заполняющих пространство, и от нефрактальных объектов. Так, для логарифмического фрактала с размерностью Хаусдорфа 2 интенсивность рассеяния уменьшается с ростом координаты Фурье q по степенному закону q^{-2} . Для кривых, заполняющих двумерное пространство, интенсивность убывает по степенному закону q^{-3} , как и для нефрактальных объектов с резкой границей на плоскости. Таким образом, во-первых, показана недостаточность модели кривых, заполняющих пространство, для описания укладки хроматина в ядре биологической клетки, во-вторых, предложена модель единого бифрактального объекта, соединяющего в себе логарифмический и массовый фракталы на различных масштабах, и, в-третьих, предложена модель укладки хроматина, способная описать данные экспериментов как по малоугловому рассеянию нейтронов, так и с использованием технологии захвата конформации хроматина.

DOI: 10.31857/S0044451023030148
EDN: QFLNDR

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие физические объекты и явления живой природы обладают свойствами самоподобия или, иначе, фрактальными свойствами [3–6]. Среди них и такой важный для всего живого на Земле объект, как ядро биологической клетки. В целом ря-

де работ с использованием малоуглового рассеяния нейтронов было показано, что структура хроматина в интерфазном ядре биологической клетки имеет фрактальный характер [2, 7–12]. Более того, оказалось, что в ядре существует два масштабных уровня с двумя принципиально разными фрактальными организациями: на масштабе от единиц микрометра до сотни нанометров реализуется фрактальная структура, называемая логарифмической, а на масштабе от сотни нанометров до десятка нанометров — структура объемного фрактала. Не вызывает сомнений, что фрактальная модель укладки хроматина в ядре является одной из самых перспективных и при-

* E-mail: grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru

влекательных, однако детального описания самой модели, описывающей его бифрактальную структуру, так и не было представлено.

Впервые гипотеза о фрактальной укладке хроматина была сформулирована группой ученых, специализировавшихся в области теоретической биофизики и физики полимеров под руководством А. Ю. Гроссберга [13, 14]. Ими была разработана модель складчатой глобулы (*crumpled globule*), которая предлагается в качестве трехмерной структуры ДНК [13]. Складчатая глобула — модель одномерной полимерной цепи, плотно заполняющей пространство без самопересечений, аналогом которой во фрактальной геометрии является кривая Пеано или любая другая кривая, заполняющая трехмерное пространство (Гильберта, Госпера и т. д.) В результате складчатая глобула стала дополнительно называться фрактальной.

Гипотеза складчатой глобулы получила подтверждение в экспериментах с использованием технологии по захвату конформации хроматина (метод Hi-C) [1]. С помощью метода Hi-C были построены карты пространственной близости генома человека. Эти карты подтвердили, во-первых, наличие хромосомных территорий и, во-вторых, пространственную близость небольших, богатых генами хромосом. Таким образом был идентифицирован дополнительный уровень организации генома, который характеризуется пространственной сегрегацией открытого и закрытого хроматина (эухроматина и гетерохроматина) с образованием двух полногеномных компартментов. Оказалось, что обнаруженная в эксперименте конформация хроматина согласуется с фрактальной глобулой, конформацией без узлов, которая обеспечивает максимально плотную упаковку, сохраняя при этом способность легко сворачиваться и разворачиваться в любом геномном локусе [1]. В настоящее время технология захвата конформации хроматина широко используется в исследованиях свойств хроматина в ядрах самых различных типов клеток [15, 16].

С разработкой технологии по захвату конформации хроматина оказалось возможным как развитие теории, так и моделирование укладки хроматина на основе хорошо разработанного теоретического базиса физики полимеров [17–20]. В этих работах авторы связывают концепцию складчатой (фрактальной) глобулы с результатами работы [1] и утверждают, что именно топологические ограничения являются основным фактором, управляющим формированием хромосомных территорий. Для доказательства этого тезиса используется молекулярно-

динамическое моделирование равновесной глобулы (гауссова клубка) и складчатой глобулы [17–20] и показывается, что экспериментальные данные [1] подтверждают выводы теории, а моделирование незаузленной складчатой глобулы приводит к образованию хромосомных территорий, подобных экспериментально обнаруженным, и хорошо описывает не только расположение хроматина, но и процессы, происходящие внутри ядра. Таким образом, была построена модель укладки хроматина в интерфазном ядре, которая основана на концепции незаузленного полимера, плотно уложенного как кривые заполняющие пространство (типа кривой Гильберта), которые, вследствие незаузленности, формируют отдельные хромосомные территории [17, 19].

Будучи несомненно успешной, модель складчатой глобулы не различает структуры различных компартментов A/B — активного и пассивного (открытого и закрытого, эу- и гетеро-) хроматина. В то же время метод захвата конформации хроматина (метод Hi-C) демонстрирует возможности различить эти два вида хроматина. Причем пассивный хроматин B оказывается более плотным по сравнению с компартментами активного хроматина A, подчеркивая тот факт, что эти компартменты могут иметь разную пространственную структуру. Следует особо отметить, что модель складчатой глобулы как кривой, заполняющей пространство, не может описать экспериментальные данные малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), которые на больших масштабах (100–5000 нм) хорошо укладываются в модель логарифмического фрактала [2]. С точки зрения экспериментов МУРН складчатая глобула (типа кривой Пеано) неотличима от любого другого однородно заполненного объекта, воспроизводящего ее форму. Следовательно, МУРН на фрактальной глобуле должен представлять классический случай рассеяния на нефрактальных трехмерных неоднородностях [21]. В действительности эксперименты МУРН на хроматине уверенно демонстрируют наличие фрактальной структуры на всех масштабах — от нанометров до микрометров [7–12], что не укладывается в модель складчатой глобулы и требует ее доработки. Можно предположить, что структура хроматина в компартментах A и B различна, и если компартмент B описывается кривой, заполняющей пространство (плотный, закрытый хроматин), то в компартменте A открытый, активный хроматин представляет собой фрактальную структуру, на малых масштабах характеризующуюся объемным фракталом, а на больших масштабах — логарифмическим фракталом.

Концепция логарифмических фракталов остается малоизученной и практически неосмысленной научным сообществом. Концепция логарифмического фрактала для двумерного пространства была введена в работе [22] для описания роста и ветвления дерева по так называемому принципу Леонардо да Винчи. Этот принцип — открытие Леонардо — известен также как правило сохранения площади, согласно которому площадь сечения ветки ниже точки ветвления равна сумме площадей сечений дочерних веток выше ее [23]. Основываясь на этом правиле, можно сделать вывод, что площадь сечения ствола дерева равна сумме площадей сечений всех веток на любом из уровней ветвления дерева. Отметим, что в случае трехмерного пространства в логарифмических фракталах неизменным оказывается объем, добавляющийся на каждом шаге «ветвления» объекта, а сама концепция дополняет классификацию фракталов, основанную на исследованиях методом малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей [21]. Пример такого трехмерного логарифмического фрактала, состоящего из кубов различного размера, был дан в работе [12].

В этой работе мы моделируем процесс рассеяния на различных типах фрактальных структур в двумерном пространстве. Представлены результаты численных экспериментов на классических фракталах, логарифмических фракталах и на кривых, заполняющих пространство. Показано, что картина рассеяния на кривых, заполняющих пространство, существенно отличается от картины рассеяния на фракталах. Кроме того, смоделирован бифрактальный объект, который иллюстрирует возможность сосуществования в одной структуре классического и логарифмического фракталов. Таким образом, мы показываем на примерах двумерного пространства, что эксперименты по рассеянию если не дают ключ к разгадке сложной организации хроматина, то ставят фундаментальные вопросы о механизмах образования фрактальных структур в ядре на масштабах от 10 нм до 10 мкм.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 представлена классификация фрактальных объектов, проводимая с помощью метода малоуглового рассеяния проникающих излучений для случая трехмерного пространства. Аналогичная классификация фракталов для двумерного пространства разработана на основе численного анализа Фурье. В разд. 3 описывается метод численного анализа Фурье, который моделирует эксперимент по малоугловому рассеянию в двумерном пространстве. В разд. 4 показано исследование логарифмических

фракталов в двумерном пространстве, а в разд. 5 — кривых, заполняющих двумерное пространство (кривые Пеано, Госпера, Гильберта). В разд. 6 сконструирован бифрактальный объект, который может рассматриваться как иллюстрация модели пространственной организации хроматина в ядре биологической клетки, и в разд. 7 представлены выводы.

2. КЛАССИФИКАЦИЯ ФРАКТАЛОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

Методы малоуглового рассеяния нейтронов и малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) уже давно стали классическим способом изучения фракталов нанометрового масштаба [24–27] и часто используются для измерения главного параметра, характеризующего фрактальную структуру, — размерности Хаусдорфа, которую также называют фрактальной размерностью.

Этими методами измеряют степенную зависимость интенсивности рассеяния от переданного импульса q :

$$I(q) \sim q^{-\Delta}, \quad (1)$$

где Δ — показатель степени, связанный с фрактальной размерностью изучаемого объекта.

Рассеяние на трехмерных однородных частицах с гладкой границей хорошо описывается законом Порода, который формулируется следующим образом: интенсивность рассеянного излучения есть степенная функция переданного импульса q (см. (1)) с $\Delta = 4$ для $q \gg 1/\xi$, где ξ — характерный размер рассеивающей частицы. Как было показано в [24–27], показатель степени Δ напрямую связан с фрактальной размерностью D , но для разных типов фракталов эта связь разная. Для массовых фракталов в трехмерном пространстве $\Delta = D$, для поверхностных фракталов $\Delta = 6 - D$. Промежуточный случай между массовыми и поверхностными фракталами соответствует логарифмическим фракталам [21]. Этот тип фракталов может быть также идентифицирован с помощью экспериментов по рассеянию, в этом случае $\Delta = 3$. Логарифмические фракталы отличаются особым типом самоподобия: в них реализуется аддитивный закон масштабирования, а не мультипликативный, как в случае с массовыми фракталами [8, 21]. Было показано, что кубическая зависимость интенсивности рассеяния нейтронов связана преобразованием Фурье с корреляционной функцией объекта $\chi(r)$, пропорциональной

$\ln(r/\xi)$, где $r/\xi < 1$, т.е. во фрактальной области [21].

Аналогично фракталам в трехмерном пространстве, с помощью метода численного фурье-анализа проведена классификация и продемонстрированы характерные особенности фрактальных объектов на плоскости [28]. В двумерном пространстве также, помимо однородных объектов с гладкой границей, можно выделить три типа фракталов: массовые, граничные и логарифмические. Фрактальные объекты в двумерном пространстве также описываются с помощью меры Хаусдорфа. Мера нефрактального объекта в двумерном пространстве равна r^2 , где r — линейный размер объекта. Для фрактальных объектов мера Хаусдорфа содержит пробную степенную функцию $h(\varepsilon) = \varepsilon^D$, а в случае логарифмических фракталов пробная функция дополнительно содержит логарифм: $h(\varepsilon) = \varepsilon^D (\ln 1/\varepsilon)^{\Delta_f}$, где ε — линейный размер пробного элемента, D — топологическая размерность объекта, Δ_f — логарифмическая под-размерность фрактала. В экспериментах по рассеянию пробные функции объектов на плоскости связаны с показателем степени Δ в (1) соотношениями, представленными в табл. 1.

Для однородно заполненных объектов с гладкой границей в двумерном пространстве (например, для круга) интенсивность рассеяния убывает с ростом q как $q^{-\Delta}$ с показателем степени $\Delta = 3$. Этот показатель на единицу меньше, чем для шара в трехмерном пространстве. Для массовых фракталов $1 < \Delta < 2$ и $\Delta = D$, для граничных $2 < \Delta < 3$ и $\Delta = 4 - D$. Промежуточный случай $\Delta = 2$ соответствует логарифмическому фракталу. Классификация фрактальных и нефрактальных объектов в двумерном пространстве, проведенная с помощью численного фурье-анализа, представлена в табл. 1. Таблица 1 содержит информацию о таких объектах, как кривая Пеано и логарифмический фрактал, исследования которых представлены в этой работе (см. разд. 4 и 5).

Пользуясь классификацией, разработанной на основе метода малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения, можно, сконструировав фрактальные и нефрактальные объекты в двумерном пространстве, аттестовать их методом численного фурье-анализа, моделирующего процессы рассеяния. В данном случае численный эксперимент по рассеянию используют как способ верификации, удостоверяющий, что объект действительно является фракталом, которому присваиваются определенные свойства, характерные для массового, граничного, логарифмического фрактала или вовсе нефрактального объекта.

Таблица 1. Классификация фрактальных и нефрактальных объектов в двумерном пространстве в экспериментах по рассеянию (* данные для логарифмического фрактала и кривой Пеано получены в рамках данной работы). Здесь Δ — показатель степени в зависимости интенсивности рассеяния от переданного импульса, определяемой в реальном или численном эксперименте, D — фрактальная размерность или размерность Хаусдорфа

Объект	Показатель степени	Размерность Хаусдорфа
Нефрактальный объект	$\Delta = 3$	$D = \Delta - 1$
Кривая Пеано	$\Delta = 3$	$D = 2^{(*)}$
Граничный фрактал	$2 < \Delta < 3$	$D = 4 - \Delta$
Логарифмический фрактал	$\Delta = 2$	$D = \Delta^{(*)}$
Массовый фрактал	$1 < \Delta < 2$	$D = \Delta$

3. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ФУРЬЕ-АНАЛИЗА В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Следует отметить, что моделирование процесса рассеяния в двумерном пространстве с помощью фурье-анализа имитирует рассеяние света на двумерных объектах — «масках», и давно вошло в учебники [29,30]. Численное моделирование экспериментов по рассеянию света на двумерных регулярных геометрических фракталах стало применяться сравнительно недавно [28,31]. В качестве модельной картины рассеяния определяют квадрат модуля фурье-образа двумерного объекта. Эксперимент по малоугловому рассеянию света моделируют, используя схему, представленную на рис. 1.

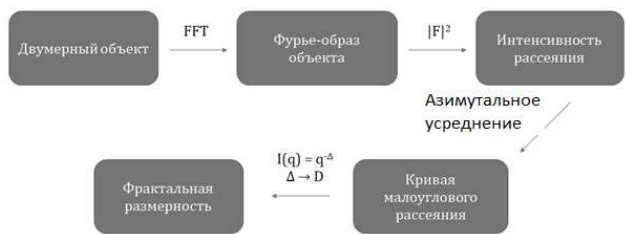


Рис. 1. Схема численного моделирования эксперимента по малоугловому рассеянию света на двумерных объектах

Схема такого численного эксперимента достаточно проста и состоит из четырех последовательных шагов. Объект исследования представляет собой образ внутри квадрата с размерами $1 \times 1 \text{ см}^2$, описывающегося бинарной двумерной матрицей. Первый шаг — фурье-преобразование объекта. Полученный фурье-образ — тоже двумерная матрица, каждый элемент которой — комплексное число — характеризуется амплитудой и фа-

зой. Второй шаг — формирование двумерной карты интенсивности, как квадрата модуля фурье-образа объекта, моделирующей интенсивность рассеяния. На этом шаге теряется информация о фазе фурье-образа. Третий шаг алгоритма — азимутальное усреднение карты интенсивности вокруг центра и получение кривой усредненной интенсивности, которая имитирует кривую малоуглового рассеяния, т.е. зависимость интенсивности рассеяния от переданного импульса (I от q). Последним шагом является определение показателя степени Δ степенного закона $I(q)$ как отношения логарифмов усредненной интенсивности $\ln I$ и координаты Фурье $\ln q$. Показатель Δ напрямую связан с фрактальной размерностью, но по-разному для разных типов фрактальных объектов (см. табл. 1).

Для обработки фрактальных изображений мы создали программу на платформе Qt [32], которая выполняет первые три шага этого алгоритма. В этом методе двумерный объект представляет собой квадрат $1 \times 1 \text{ см}^2$, состоящий из $N \times N$ единичных элементов (пикселей), где N должно быть равно 2^n , $n = 1, 2, 3, \dots$. Мы используем быстрое преобразование Фурье, чтобы сократить время вычислений. Карта интенсивности — это распределение интенсивности «рассеяния» по компонентам вектора Фурье q_x, q_y , выраженным в единицах обратной длины. Максимальное значение координаты q можно вычислить как $\pi N/X$, где X — общий размер изображения в единицах длины, N — размер изображения в пикселях, X/N — размер одного пикселя в единицах длины. Оси q_x и q_y разделены на N равных интервалов, а размер пикселя в пространстве Фурье равен π/X . Поскольку все реальные фракталы ограничены как по максимальному размеру, так и по размеру минимального элемента, важно контролировать разрешающую способность метода Фурье. Во-первых, размер фрактального объекта должен быть меньше размера всего изображения и, во-вторых, размер минимального элемента фрактала должен быть в несколько раз (>3) больше размера минимального элемента изображения (одного пикселя). При анализе кривых усредненных интенсивностей необходимо отличать фрактальный диапазон координаты Фурье от нефрактальных диапазонов, возникающих при очень малом и очень большом q .

4. ЛОГАРИФМИЧЕСКИЙ ФРАКТАЛ В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Сконструируем пример логарифмического фрактала на плоскости, покажем, что объект действи-

тельно соответствует определению логарифмического фрактала, и определим нишу, в которую такой объект попадает в рамках классификации по методу малоуглового рассеяния.

По определению логарифмические фракталы — это фракталы с логарифмической мерой. Пробная функция в такой мере является произведением степенной функции с аргументом ε и степенной функции от логарифма $1/\varepsilon$ [3, 22]:

$$h(\varepsilon) = \varepsilon^D \left(\ln \frac{1}{\varepsilon} \right)^{\Delta_f}. \quad (2)$$

Здесь D — фрактальная размерность, Δ_f — фрактальная подразмерность, ε — линейный размер пробных элементов, покрывающих фрактал.

Известен двумерный логарифмический фрактал, описывающий рост дерева и основанный на «принципе да Винчи» [22, 23]: сумма площадей поперечных сечений ветвей на каждом уровне равна площади поперечного сечения ствола дерева (фрактал «Дерево да Винчи»). На рис. 2 показан принцип построения этого фрактала.

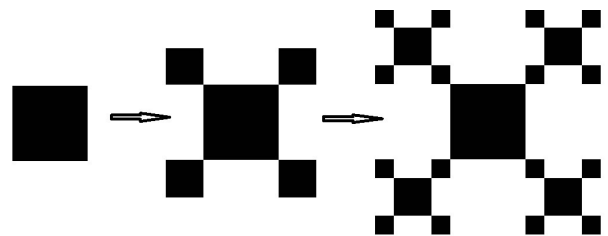


Рис. 2. Построение логарифмического фрактала роста дерева по принципу «да Винчи» (базовый элемент — квадрат, 1 и 2 поколения)

В каждом новом поколении к углам каждого наименьшего на данный момент квадрата добавляются четыре квадрата, каждый из которых по площади в четыре раза меньше квадрата предыдущего поколения. Следует отметить, что в отличие от построения геометрических фракталов, таких как ковер Серпинского, здесь добавление квадратов следующего поколения происходит не для всего фрактала, а только для квадратов предыдущего поколения.

Площадь фрактала с каждым новым поколением увеличивается на площадь «ствола» (самого большого квадрата). Таким образом, площадь всего фрактала n -го поколения будет в n раз больше площади «ствола».

Пусть линейный размер «ствола» равен 1. Тогда площадь всего фрактала n -го поколения будет равна n , а линейный размер ε квадратов n -го поколения

и число поколений n фрактала будут связаны следующими выражениями:

$$\varepsilon = \frac{1}{2^{n-1}}, \quad n = \frac{1}{\ln 2} \ln \frac{1}{\varepsilon} + 1. \quad (3)$$

Пусть $N(\varepsilon)$ — количество квадратов линейного размера ε , покрывающих весь фрактал. Тогда $N(\varepsilon)$ можно выразить как

$$N(\varepsilon) = \frac{n}{\varepsilon^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\ln \frac{1}{\varepsilon} / \ln 2 + 1 \right). \quad (4)$$

Как известно [3, 22], фрактальная мера $\mu(\varepsilon)$ — это величина, поведение которой определяется произведением пробной функции $h(\varepsilon)$ и числа покрытий $N(\varepsilon)$. По определению, мера должна стремиться к константе, когда значение ε стремится к нулю. Таким образом, пробная функция этого объекта имеет вид

$$h(\varepsilon) = \varepsilon^2 \left(\ln \frac{1}{\varepsilon} \right)^{-1}, \quad N(\varepsilon)h(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\ln 2}. \quad (5)$$

Сравнивая соотношения (2) и (5), получаем $D = 2$, $\Delta_f = -1$. Таким образом, фрактал, описывающий рост дерева, построенный по принципу «да Винчи», действительно является логарифмическим фракталом с фрактальной размерностью 2, что равно его топологической размерности [22].

Мы исследовали изображения этого фрактала разных поколений от 1-го до 7-го методом численного анализа Фурье. Для каждого изображения были получены усредненные зависимости интенсивности от координаты Фурье q , моделирующие кривые малоуглового рассеяния. Размер изображений — $1 \times 1 \text{ см}^2$ и 2048×2048 пикселей².

На рис. 3а, б показаны 3-е и 7-е поколения этого фрактала. Усредненные значения интенсивности в зависимости от координаты Фурье q показаны на рис. 3с.

Кривые, полученные в результате преобразования Фурье на рис. 3с, демонстрируют осциллирующее поведение, затухающее при увеличении переданного импульса q . Осцилляции имеют квазипериодический характер в логарифмическом масштабе в левой части кривых, при этом в правой части они становятся периодическими в линейном масштабе, что указывает на переход к нефрактальному режиму. Кроме того, показатель степени (наклон кривых в логарифмическом масштабе) изменяется при смене режимов. Точка пересечения двух режимов характеризует границу фрактала со стороны малых размеров. Эти точки кроссовера различны для разных поколений и равны 201 см^{-1} для фрактала 3-го

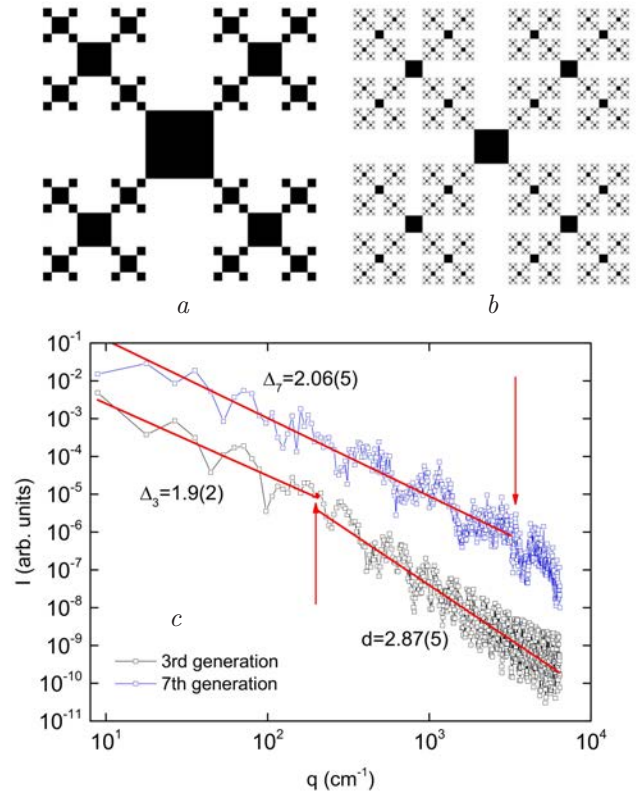


Рис. 3. Изображение логарифмического фрактала 3-го (а) и 7-го (б) поколений. Усредненные зависимости интенсивности от координаты Фурье q для 3-го и 7-го поколений логарифмического фрактала (с). Стрелками показана верхняя (по переданному импульсу q) граница фрактального диапазона

поколения и 3217 см^{-1} для фрактала 7-го поколений. Мы оцениваем эти значения как $\pi \cdot 2048/32$ и $\pi \cdot 2048/2$ для 3-го и 7-го поколений соответственно, учитывая, что линейный размер минимального элемента для фрактала 7-го поколения составляет 2 пикселя, а для фрактала 3-го поколения — 32 пикселя.

Таким образом, кривые в диапазонах $q < 201 \text{ см}^{-1}$ и $q < 3217 \text{ см}^{-1}$ относятся к фрактальной области для 3-го и 7-го поколений соответственно, а кривые для диапазонов $q > 201 \text{ см}^{-1}$ и $q > 3217 \text{ см}^{-1}$ характеризуют минимальный элемент фрактала. Если усреднить осцилляции и аппроксимировать зависимость интенсивности от q степенным законом $q^{-\Delta}$ в разных диапазонах, то показатель степени Δ будет равен 1.9 ± 0.2 ($q < q_c$) и 2.87 ± 0.05 ($q > q_c$) для 3-го поколения и 2.06 ± 0.05 ($q < q_c$) для 7-го поколения (рис. 3с). Таким образом, наклон кривой усредненной интенсивности Δ близок к -2 в пределах фрактального диапазона и близок к -3 вне фрактального диапазона, что соответствует рассеянию

на объектах с резкой границей в двумерном пространстве (квадрат). Можно сделать вывод, что наклон Δ для фрактального диапазона исследуемого объекта равен размерности Хаусдорфа строительного блока фрактального объекта $\Delta = D$.

Как показано в работе [28], если объект не является фрактальным, то наклон кривой рассеяния равен $\Delta = -3$. Логарифмическая специфика фрактала проявляется в том, что наклон кривой на 1 меньше наклона кривой нефрактального объекта.

5. КРИВЫЕ ПЕАНО В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Помимо логарифмических фракталов существует целый класс объектов, имеющих размерность Хаусдорфа равную двум — кривые Пеано. По определению кривые Пеано — это кривые, заполняющие пространство без самопересечений. Сконструируем примеры кривой Пеано на плоскости, вычислим ее меру и покажем, что объект, в соответствии со своим определением, попадает в нишу объектов, обладающих резкой границей и однородных внутри, в соответствии с классификацией по методу малоуглового рассеяния.

Рассмотрим кривую, изобретенную самим Джузеппе Пеано. Принцип ее построения показан на рис. 4. Числа на рис. 4 показывают порядок этапов строительства.

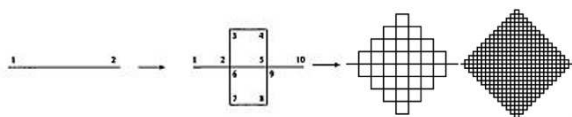


Рис. 4. Построение кривой Пеано от базового элемента до третьего поколения

Эта кривая не имеет самопересечения, хотя в некоторых точках происходит самокасание. Длина сегментов этой кривой уменьшается в три раза для каждого следующего поколения, а количество сегментов линии увеличивается в 9 раз. Следовательно, длина сегментов равна $\varepsilon = 1/3^n$ для n -го поколения кривой Пеано, а количество этих сегментов равно $N(\varepsilon) = 9^n$. Тогда

$$N(\varepsilon) = 3^{2n} = 3^{2 \log_3(1/\varepsilon)} = \frac{1}{\varepsilon^2} = \varepsilon^{-2}. \quad (6)$$

Это показывает, что пробная функция этого объекта равна $h(\varepsilon) = \varepsilon^2$, имеет размерность квадрата, при этом являясь линией. Никакой логарифмической подразмерности у этого объекта нет. Такие

же выражения можно получить для других кривых типа Пеано: кривой Гильберта, кривой Госпера и т. д. Принципы построения кривой Госпера и кривой Гильберта показаны на рис. 5 и рис. 6.

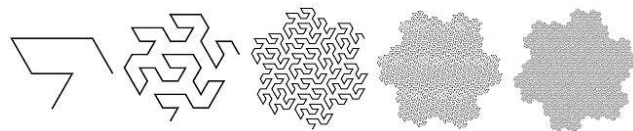


Рис. 5. Построение кривой Госпера от базового элемента до четвертого поколения

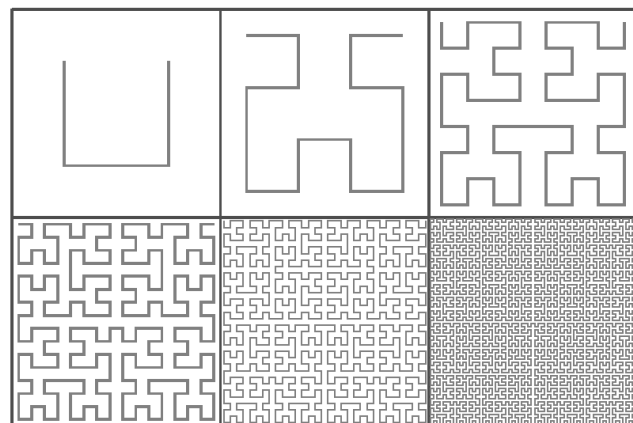


Рис. 6. Построение кривой Гильберта от базового элемента до пятого поколения

С помощью метода численного анализа Фурье мы получили кривую усредненной интенсивности, моделирующую кривую малоуглового рассеяния, для кривых Пеано, Госпера и Гильберта. Они представлены на рис. 7.

Все три кривые демонстрируют убывание интенсивности на левой стороне и систему пиков на правой стороне (рис. 7). Показатели наклона усредненных кривых интенсивности для кривых Пеано и Гильберта рассчитывались как показатели наклона огибающих. Для кривой Госпера мы использовали линейную аппроксимацию данных. Было получено, что наклоны кривых Пеано, Госпера и Гильберта равны $\Delta = 3.01 \pm 0.02$, $\Delta = 2.94 \pm 0.05$ и $\Delta = 2.94 \pm 0.02$ соответственно. Таким образом, для семейства кривых Пеано показатель Δ в (1) близок к 3, как для объекта с резкой границей в двумерном пространстве. Другими словами, эксперимент по рассеянию «видит» такие кривые как фигуры, которые имеют однородную «заливку». Как отмечалось выше, в области больших значений координаты Фурье q возникает некоторая система пиков, своя для каждой кривой. Анализируя кривые усредненной интенсивности для разных поколений каждой

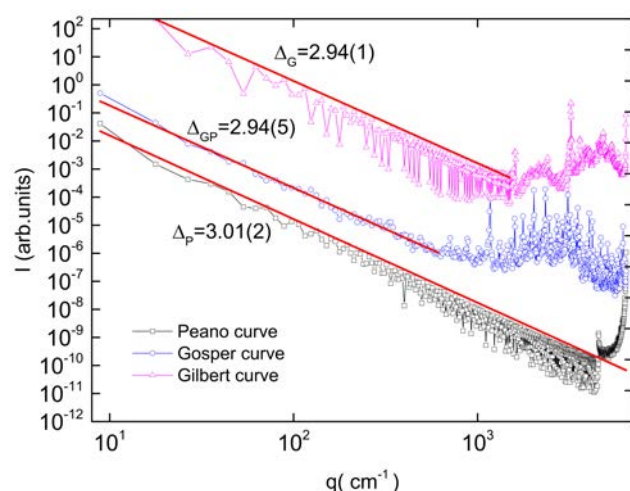


Рис. 7. Кривые усредненной интенсивности для 6-го поколения кривой Пеано (квадраты), 6-го поколения кривой Госпера (кружки) и 7-го поколения кривой Гилберта (треугольники)

кривой Пеано, мы пришли к выводу, что эта система пиков описывает формфактор базового элемента кривой Пеано. Естественно, что базовый элемент кривой, а также его преобразование Фурье для разных кривых различны.

Таким образом, эксперимент по рассеянию «видит» кривые Пеано как двумерные объекты с резкими границами. Это легко понять: в случае, когда кривая заполняет конечный плоский объект, он представляет собой двумерную фигуру (в данном случае квадрат), равномерно заполненную линиями и окруженную пустым пространством. Это равномерное заполнение плоского объекта дает нам показатель степени $\Delta = 3$, как и для любого двумерного однородно заполненного объекта с гладкими границами.

Несмотря на то, что кривые Пеано удовлетворяют нестрогому определению фрактала, которое дал в своей работе Мандельброт [3], поскольку их размерность Хаусдорфа строго больше их топологической размерности равной 1, такие объекты нельзя считать фракталами. Они не фракталы не только из-за их целочисленной размерности Хаусдорфа, но и потому, что плотность кривых Пеано однородно распределена в объекте, тогда как для фрактальных объектов характерно неравномерное распределение плотности в занимаемой фракталом области пространства.

Следует отметить, что, несмотря на то что размерности Хаусдорфа кривой Пеано и объекта с резкой границей совпадают, их все же можно различить в эксперименте по малоугловому рассеянию

благодаря системе пиков, которая присутствует на кривых малоуглового рассеяния при больших значениях переданного импульса. Эта система пиков характеризует фурье-образ минимального элемента, по которому строится та или иная кривая Пеано. В этом их главное отличие от простого нефрактального объекта с резкой границей.

6. МОДЕЛЬ БИФРАКТАЛЬНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ХРОМАТИНА В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Эта работа мотивирована необходимостью интерпретации экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) на хроматине внутри ядра биологической клетки [7–12]. Эксперименты МУРН демонстрируют бифрактальную организацию хроматина, которая не укладывается в концепцию складчатой глобулы по типу кривой Пеано, предложенной в работах [13, 14]. Моделирование эксперимента по малоугловому рассеянию в двумерном пространстве ясно демонстрирует, что модель кривых заполнения пространства имитирует однородно заполненный объект с резкой границей и не является ни фрактальным объектом с дробной размерностью Хаусдорфа, ни логарифмическим фракталом. Другими словами, в эксперименте по рассеянию излучения логарифмические фракталы и классические фракталы можно однозначно отличить от кривых Пеано и нефрактальных объектов.

Чтобы сконструировать модель бифрактальной организации хроматина в ядре клетки, мы создали фрактал, который состоит из логарифмического фрактала «Дерево да Винчи» и «вложенного в него» фрактала Вишека («Снежинка Вишека»).

Фрактал Вишека генерируется следующим образом: берем квадрат, разбиваем его на девять одинаковых квадратов и удаляем те квадраты, которые находятся не в углах и не в центре. Затем повторяем эту процедуру для каждого из оставшихся квадратов и т. д. (рис. 8).



Рис. 8. Схема построения фрактала Вишека (2-е, 3-е, 4-е поколения)

Именно такой фрактал мы использовали вместо минимальных элементов фрактала «Дерева да Винчи», которые обычно представляют собой однородные квадраты (рис. 3). Полученный комбинацией двух фракталов объект по существу и является бифракталом. Для того чтобы модель соответствовала масштабам задачи, были выбраны 4-е поколения каждого из фракталов. В этом случае минимальный крест фрактала Вишека в 27 раз меньше всей «Снежинки Вишека», которая является в этой конструкции минимальным элементом «Дерева да Винчи». При этом минимальный элемент «Дерева да Винчи» в 32 раза меньше всего «Дерева да Винчи». Таким образом, минимальный крест фрактала Вишека в 862 раза меньше всего бифрактала, т.е. весь диапазон масштабов этого объекта пробегает 3 порядка по линейной шкале размеров, что соответствует, например, диапазону от 10 нм до 10 мкм. Построенный бифрактал изображен на рис. 9.

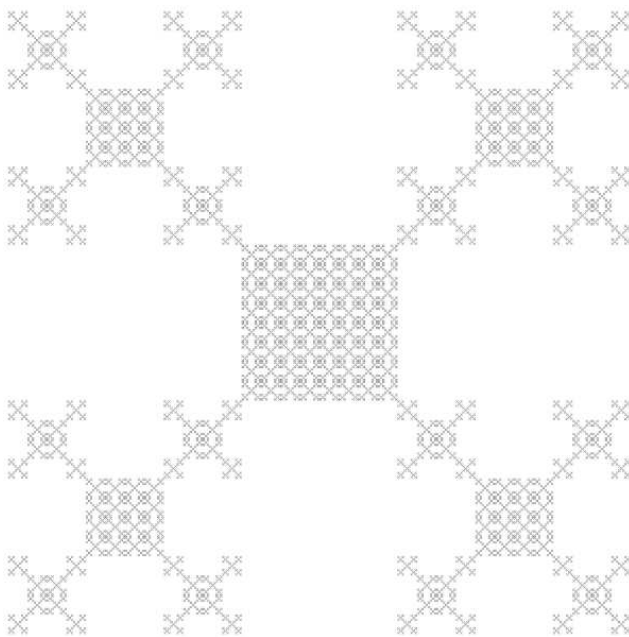


Рис. 9. Бифрактал, состоящий из фрактала «Дерево да Винчи» на крупном масштабе и фрактала «Снежинка Вишека» на более мелком масштабе

Результат численного эксперимента по моделированию процесса рассеяния на таком фрактале показан на рис. 10. Как видно из рис. 10, кривая рассеяния, построенная в двойном логарифмическом масштабе, демонстрирует две фрактальные области: одна имеет наклон $\Delta = 2.09 \pm 0.20$ и соответствует логарифмическому фракталу, вторая имеет наклон 1.47 ± 0.03 и соответствует фракталу «Снежинка Ви-

шека», теоретическая фрактальная размерность которого равна 1.465.

Чтобы четко различать два разных диапазона по переданному импульсу q , мы приводим график Кратки как произведение $(I(q)q^2)$ в зависимости от q на вставке к рис.10. Такое представление экспериментальных данных выделяет кривую рассеяния q^{-2} , делая более очевидными другие особенности. В частности, произведение $(I(q)q^2)$ в q -диапазоне для фрактала «Дерево да Винчи» теперь оказалось константой. Наклон кривой в этой области оказался равен нулю ($\Delta - 2 = 0.04 \pm 0.20$).

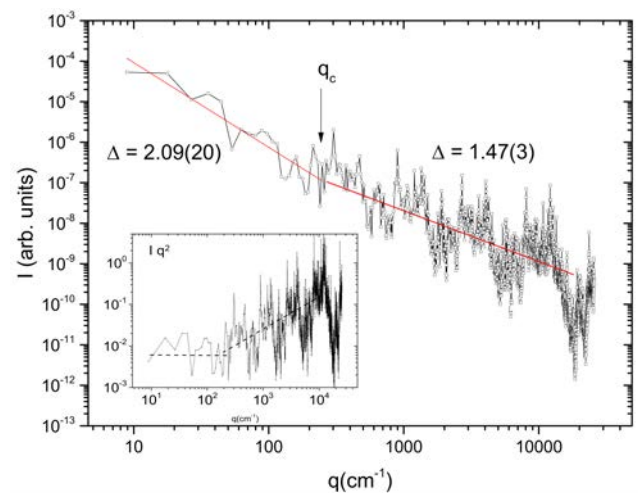


Рис. 10. Усредненная кривая интенсивности для бифрактала, состоящего из 4-й генерации фрактала «Дерево да Винчи» и 4-й генерации фрактала «Снежинка Вишека»

Таким образом, сконструированный нами бифрактальный объект точно воспроизводит бифрактальный характер кривых малоуглового рассеяния нейтронов, получаемых в экспериментах на ядрах различных типов биологических клеток [7–12]. Построенная таким образом бифрактальная конструкция, несмотря на то, что задача решается в двумерном пространстве, может служить еще одним шагом на пути создания модели организации хроматина в ядре биологической клетки.

При переходе в трехмерное пространство вопрос о совместимости модели укладки хроматина, разработанной в результате эксперимента методом захвата конформации хроматина (метод Hi-C) [1, 17–20] — модель складчатой глобулы, и модели на основе данных МУРН — модели бифрактальной структуры [7–12], остается открытым. Попытка комбинации данных этих двух экспериментов была сделана в глубоком, всеобъемлющем обзоре [19].

Как указывалось в [19], модель складчатой глобулы основана на предположении об отсутствии сильных вариаций плотности на масштабах порядка длины запутанности и выше. Классические цветные изображения хроматиновых территорий предполагают однородную плотность по всему клеточному ядру. Это, однако, может ввести в заблуждение, поскольку длина волны видимого света слишком велика, чтобы можно было легко разрешить глазу большее изменение локальной плотности. Для того чтобы заглянуть внутрь ядра, необходимо прибегнуть к экспериментам по рассеянию. Правда, единственный известный на тот момент эксперимент на ядрах куриных эритроцитов не позволил провести адекватную процедуру сравнения результатов МУРН и метода Hi-C, поскольку куриные эритроциты весьма отличны от других эукариотических клеток. Дополнительно авторами было выдвинуто предположение, на наш взгляд, ошибочное, что складчатая глобула будет иметь закон рассеяния, пропорциональный Q^{-3} .

В настоящей работе мы показываем, что если складчатая глобула описывается в большей или меньшей степени кривой Гильберта (или Пеано), то закон рассеяния от нее должен иметь вид закона Порода, как от частицы с гладкой поверхностью в трехмерном пространстве, Q^{-4} . При этом закон Q^{-3} соответствует структуре логарифмического фрактала, наблюдаемого в экспериментах по МУРН [7–12]. В то же время структура логарифмического фрактала может быть сформирована некими структурными единицами — объемными фракталами, описываемыми Q^{-D} , где D — фрактальная размерность объекта. Опираясь на данные малоуглового рентгеновского рассеяния, мы идентифицируем этот объект как единицу активного хроматина — компартмента А, наблюдаемого в методе Hi-C. Интересно отметить, что характерный максимальный размер этого объекта меняется в зависимости от степени активности транскрипции в ядре клетки и составляет величину порядка 100 нм. Особенностью нашей модели является и тот факт, что вся структура логарифмического фрактала, состоящего из малых единиц объемного фрактала активного хроматина, окружена плотной укладкой неактивного, закрытого гетерохроматина, который вполне может быть охарактеризован кривой типа Гильберта — компартмент В, наблюдаемый в методе Hi-C. Такой хроматин, по сути, является сплошной средой для нейтронного или рентгеновского излучения, которая, в свою очередь, ограничена размерами ядра. Подробное описание трехмерной модели хроматина выхо-

дит за рамки данной работы, но в ней представлена целостная картина, непротиворечивым образом описывающая результаты экспериментов, как метода МУРН, так и метода Hi-C.

7. ВЫВОДЫ

В этой работе сконструированы логарифмические фракталы и кривая Пеано в двумерном пространстве, а затем исследованы методом численного анализа Фурье, моделирующего эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов. Результаты сведены в классификационную таблицу фрактальных объектов в двумерном пространстве, которая дополнена новым классом — логарифмическими фракталами (табл. 1).

Показано, что для логарифмических фракталов в экспериментах по рассеянию показатель степени Δ равен их размерности Хаусдорфа, а для кривых Пеано в экспериментах по рассеянию показатель Δ равен 3, как для двумерного объекта с резкими границами.

Построена бифрактальная модель пространственной организации хроматина в ядре биологической клетки. Численные эксперименты по малоугловому рассеянию от единого бифрактального объекта, объединяющего в себе логарифмический фрактал и классический фрактал, подтверждают сходство предложенной модели и реального объекта, поскольку модельная кривая повторяет характерные особенности реальных кривых малоуглового рассеяния на ядрах биологической клетки.

Финансирование. Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 20-12-00188).

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Lieberman-Aiden, N. L. van Berkum, L. Williams, M. Imakaev, T. Ragoczy, A. Telling, I. Amit, B. R. Lajoie, P. J. Sabo, M. O. Dorschner, R. Sandstrom, B. Bernstein, M. A. Bender, M. K. Groudine, A. Gnirke, J. Stamatoyannopoulos, L. A. Mirny, E. S. Lander, and J. Dekker, *Science* **326**, 289 (2009).
2. Е. Г. Яшина, С. В. Григорьев, *ЖЭТФ* **156**, 540 (2019).
3. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, New York (1983).
4. H. O. Peitgen and P. H. Richter, *The Beauty of Fractals*, Springer, Berlin (1986).

5. L. S. Liebovitch, *Fractals and Chaos Simplified for the Life Sciences*, Oxford University Press, New York (1998).
6. I. C. Andronache, H. Ahammer, H. F. Jelineck, D. Peptenatu, Ana-M. Ciobotaru, C. C. Draghici, R. D. Pintili, A. G. Simion, and C. Teodorescu, *Chaos, Solitons and Fractals* **91**, 310 (2016).
7. D. V. Lebedev, M. V. Filatov, A. I. Kuklin, A. K. Islamov, E. Kentzinger, R. A. Pantina, B. P. Toperverg, and V. V. Isaev-Ivanov, *FEBS Lett.* **579**, 1465 (2005).
8. E. G. Iashina, E. V. Velichko, M. V. Filatov, W. G. Bouwman, C. P. Duif, A. Brulet, and S. V. Grigoriev, *Phys. Rev. E* **96**, 012411 (2017).
9. E. G. Iashina, M. V. Filatov, R. A. Pantina, E. Yu. Varfolomeeva, W. G. Bouwman, Ch. P. Duif, D. Honecker, V. Pipich, and S. V. Grigoriev, *J. Appl. Cryst.* **52**, 844 (2019).
10. S. V. Grigoriev, E. G. Iashina, V. Yu. Bairamukov, V. Pipich, A. Radulescu, M. V. Filatov, R. A. Pantina, and E. Yu. Varfolomeeva, *Phys. Rev. E* **102**, 032415 (2020).
11. S. V. Grigoriev, E. G. Iashina, B. Wu, V. Pipich, Ch. Lang, A. Radulescu, V. Yu. Bairamukov, M. V. Filatov, R. A. Pantina, and E. Yu. Varfolomeeva, *Phys. Rev. E* **104**, 044404 (2021).
12. E. G. Iashina, E. Yu. Varfolomeeva, R. A. Pantina, V. Yu. Bairamukov, R. A. Kovalev, N. D. Fedorova, V. Pipich, A. Radulescu, and S. V. Grigoriev, *Phys. Rev. E* **104**, 064409 (2021).
13. A. Yu. Grosberg, S. K. Nechaev, and E. I. Shakhnovich, *J. Phys. France* **49**, 2095 (1988).
14. A. Grosberg, Y. Rabin, S. Havlin, and A. Neer, *Europhys. Lett.* **23**, 373 (1993).
15. Н. Р. Батуллин, В. С. Фишман, А. А. Хабарова, М. Ю. Помазной, Т. А. Шнайдер, Д. А. Афонников, О. Л. Серов, *Вавиловский журнал генетики и селекции* **18** (2), 338 (2014).
16. A. Zlotina, A. Maslova, N. Kosyakova, A. B. H. Al-Rikabi, T. Liehr, and A. Krasikova, *Chromosome Res.* **27**, 253 (2019).
17. L. A. Mirny, *Chromosome Res.* **19**, 37 (2011).
18. J. D. Halverson, W. B. Lee, G. S. Grest, A. Y. Grosberg, and K. Kremer, *J. Chem. Phys.* **134**, 204904 (2011).
19. J. D. Halverson, J. Smrek, K. Kremer, and A. Y. Grosberg, *Rep. Prog. Phys.* **77**, 022601 (2014).
20. M. V. Imakaev, K. M. Tchourine, S. K. Nechaev, and L. A. Mirny, *Soft Matter* **11**, 665 (2015).
21. Е. Г. Яшина, С. В. Григорьев, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **9**, 5 (2017).
22. J. O. Indekeu and G. Fleerackers, *Physica A* **261**, 294 (1998).
23. J. P. Richter and R. C. Bell, *The Notebooks of Leonardo da Vinci*, Dover, New York (1970).
24. J. E. Martin and A. J. Hurd, *J. App. Crystallogr.* **20** (2), 61 (1987).
25. J. Teixeira, *J. App. Crystallogr.* **21**, 781 (1988).
26. D. I. Svergun, M. H. J. Koch, P. A. Timmins, and R. P. May, *Small Angle X-ray and Neutron Scattering from Solutions of Biological Macromolecules*, Oxford University Press, Oxford (2013).
27. T. Ficker, A. Len, and P. Nemes, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 4055 (2007).
28. П. М. Пустовойт, Е. Г. Яшина, К. А. Пшеничный, С. В. Григорьев, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **12**, 3 (2020).
29. Дж. Гудмен, *Введение в фурье-оптику*, Мир, Москва (1970).
30. А. Н. Матвеев, *Оптика*, Высшая школа, Москва (1985).
31. А. А. Зинчик, Я. Б. Музыченко, А. В. Смирнов, С. К. Стафеев, *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО* **60** (2), 17 (2009).
32. <https://github.com/tre3k/fractal>

КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ГЕЛИЯ ПРИ ПОСТОЯННОЙ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ 21000 К ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 600 ГПа

М. А. Мочалов ^{a,b}, Р. И. Илькаев ^a, **В. Е. Фортков** ^c, С. В. Ерунов ^{a,b}, В. А. Аринин ^a,
А. О. Бликов ^{a,b*}, В. А. Огородников ^{a,b}, А. В. Рыжков ^a, В. А. Комраков ^a, А. Е. Ковалев ^a,
М. Г. Новиков ^{a,b}, И. П. Максимкин ^a, С. А. Финюшин ^a, Е. А. Чудаков ^{a,b}, М. И. Лихутов ^a,
В. К. Грязнов ^d, И. Л. Иосилевский ^c, П. Р. Левашов ^c, Д. В. Минаков ^c, М. А. Парамонов ^c

^a Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия

^b Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева
603950, Нижний Новгород, Россия

^c Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

^d Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 15 августа 2022 г.,
после переработки 26 сентября 2022 г.
Принята к публикации 26 сентября 2022 г.

Представлены данные по квазиизэнтропической сжимаемости сильно неидеальной плазмы гелия в области давлений 250–600 ГПа в устройствах цилиндрической геометрии. Измерена температура на фронте цилиндрической ударной волны в гелии $T \approx 10000$ К и скорость полета внутреннего каскада $W \approx 3.5$ км/с, в полости которого и достигается максимальная плотность сжатой плазмы. Получены данные о сжатии неидеальной плазмы гелия до плотности $\rho \approx 3$ г/см³ при приблизительно постоянной конечной температуре 21000 К. Траектории движения металлических оболочек, сжимающих плазму, регистрировались с помощью мощных импульсных источников рентгеновского излучения с граничной энергией электронов до 60 МэВ. Плотность плазмы гелия определялась по измеренному значению радиуса оболочек в момент их «остановки». Давление сжатой плазмы получено на основе газодинамических расчетов. Проведены сравнительные теоретические расчеты параметров квазиизэнтропического сжатия по двум теоретическим моделям: традиционной химической модели плазмы (код SANA) и в рамках подхода *ab initio* — квантовой молекулярной динамики (QMD). Аномалия экспериментальных данных в области давлений теоретически предполагаемого плазменного фазового перехода в гелии не зарегистрирована.

DOI: 10.31857/S004445102303015X
EDN: QFMCVP

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию свойств неидеальной плазмы гелия во многом связан с многочисленными предсказаниями существования в плотном и горячем флюиде гелия аномалий типа необычных «плазменных» (ionization-driven) фазовых перехо-

дов (ПФП). Следует подчеркнуть, что проблема существования ПФП в неидеальной плазме гелия интересна не только сама по себе, но и в важном для астрофизики аспекте свойств плотных и горячих смесей гелия с водородом, где к собственно проблеме ПФП добавляется проблема специфических особенностей таких переходов, т. е. возможности расслоений на фазы с различающимся химическим составом [1]. Более простая задача расчета параметров ПФП в плотной горячей смеси гелия с водородом во

* E-mail: mcleodjr@mail.ru

всем диапазоне пропорций He/H_2 , но без учета этих особенностей решалась еще в работе [2].

Теоретические предсказания свойств плазменных фазовых переходов в гелии достаточно многочисленны. До недавнего времени эти предсказания в основном использовали химическую модель плазмы, называемую также иногда методом минимизации свободной энергии [3]. При этом предсказания ПФП в плазме гелия делались как в варианте единого ПФП с одномоментной двукратной ионизацией ($\text{He} \leftrightarrow \text{He}^{++} + 2e^-$) [4], так и в варианте двух последовательных ПФП отдельно на первой и второй стадиях ионизации гелия [2, 5–8]. В работах [5, 8] показана возможность ионизационного фазового перехода первого рода в гелиевой плазме при средней плотности ядер 10^{22} – 10^{23} см^{-3} и температуре $T \leq 50000 \text{ К}$. Несколько меньшая температура фазового перехода с однократной ионизацией гелия была предсказана при $T \approx 28500 \text{ К}$ в модели [6]. В работе [9] металлизация гелия предсказана при плотности $\rho \approx 5.3 \text{ г/см}^3$. Различными авторами на основе расчетов зонной структуры были получены значения давления металлизации гелия от 300 до 20000 ГПа [10–13]. Современные расчеты, реализованные в рамках строгого подхода *ab initio* (DFT/MD) [14], предсказывают металлизацию в плотном жидком гелии в диапазоне давлений $P = 10000$ – 20000 ГПа .

Возвращаясь к обзору предсказаний ПФП в рамках химической модели плазмы, отметим прежде всего работы [5, 7, 8], где с использованием в расчетах метода суммарного химического потенциала предсказан двухстадийный сценарий ПФП, состоящий из двух фазовых переходов, начинающихся соответственно из двух тройных точек с параметрами $T_1 \approx 1000 \text{ К}$ и $P_1 \approx 200 \text{ ГПа}$ (ПФП-1) и $T_2 \approx 4000 \text{ К}$ и $P_2 \approx 3000 \text{ ГПа}$ (ПФП-2). Оба перехода заканчиваются критическими точками C_1 и C_2 с параметрами $T_{C_1} \approx 35000 \text{ К}$, $P_{C_1} \approx 660 \text{ ГПа}$ и $\rho_{C_1} \approx 2.13 \text{ г/см}^3$ (ПФП-1) и $T_{C_2} \approx 120000 \text{ К}$, $P_{C_2} \approx 10000 \text{ ГПа}$ и $\rho_{C_2} \approx 10 \text{ г/см}^3$ (ПФП-2). Авторы работы [2] рассчитали в гелии параметры ПФП с однократной ионизацией гелия и относительно высокими параметрами участка $P(T)$ -границы ПФП примерно между начальной точкой ($T \approx 4000 \text{ К}$, $P \approx 550 \text{ ГПа}$) и критической точкой ($T_C \approx 20000 \text{ К}$, $P_C \approx 800 \text{ ГПа}$). Так же далеко находится гипотетическая граница единого ПФП с двукратной ионизацией, предсказанная в теоретической модели работы [4]. Согласно [4], эта граница приближенно соответствует участку изохоры $\rho \approx 10 \text{ г/см}^3$ с температурой от $T \approx 20000 \text{ К}$ до $T \approx 100000 \text{ К}$.

В последние годы во ВНИИЭФ удалось продвинуться в диапазон мегабарных давлений, используя метод квазиизэнтропического сжатия газов в двухкаскадных устройствах цилиндрической и сферической геометрий. В экспериментах с гелием при равном начальном давлении газа в обоих каскадах около 25 МПа свойства плазмы гелия, сжатой до плотности примерно 8 г/см^3 в области давлений до 4800 ГПа, исследовались в работах [15–18]. Согласно расчетам, проведенным в рамках химической модели плазмы [3, 19], полученные состояния сильно неидеальной плазмы гелия при давлении $P \approx 4800 \text{ ГПа}$ характеризуются высокими значениями параметра кулоновской неидеальности $\Gamma_D \approx 20$ и параметра вырождения электронов $n_e \lambda_e^3 \approx 20$ (λ_e — тепловая длина волны де Бройля для электрона).

В экспериментах [18, 20] с использованием двухкаскадной сферической камеры с разделенными полостями при соотношении начального давления газа во внешней и внутренней полостях двухкаскадной сферической конструкции 9 : 1 исследованы свойства квазиизэнтропически сжатой плазмы гелия при высоких степенях сжатия до 900 раз. Выбранные значения начальных давлений гелия позволили обеспечить размер сжатой полости, доступный для его регистрации на рентгенографическом оборудовании ВНИИЭФ, и реализовать высокую степень сжатия плазмы. В эксперименте [21] с использованием сферической двухкаскадной камеры и заряда ВВ с массой $M \approx 85 \text{ кг}$ в тротиловом эквиваленте неидеальная плазма гелия сжата до плотности $\rho \approx 9 \text{ г/см}^3$ давлением $P \approx 10000 \text{ ГПа}$, а в эксперименте [22] — до плотности $\rho \approx 13 \text{ г/см}^3$ давлением $P \approx 16700 \text{ ГПа}$.

Анализ опубликованных данных показывает, что все результаты со сферическими устройствами из работ [15–18, 20–22] расположены на P – T -диаграмме гелия в области однократно ионизованной плазмы выше критической точки ПФП-1 [7], а результаты опытов с цилиндрическими конструкциями с гелием из [23] расположены ниже $P(T)$ -границы ПФП-1. Таким образом, до настоящего времени области состояний гелия, где предсказываются плазменные фазовые переходы ПФП-1 и ПФП-2 [7], оставались недоступными для исследователей.

В настоящей работе представлены конструкции новых двухкаскадных цилиндрических устройств, которые позволили при постоянной конечной температуре $T \approx 21000 \text{ К}$ исследовать свойства квазиизэнтропически сжатого гелия в диапазоне давлений 200–600 ГПа, который включает в себя и область теоретически предполагаемого [7] ПФП-1

($P \approx 400$ ГПа при $T \approx 20500$ К). Полученные данные позволили проверить гипотезу о возможных изменениях в сжимаемости плазмы гелия в области гипотетического плазменного перехода ПФП-1.

2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследования сжимаемости гелия в экспериментах настоящей работы использованы конструкции цилиндрической геометрии [24, 25], в том числе со стержнем из стали в центре, позволяющие реализовать равномерный профиль давления по радиусу в плазме сжатого вещества. Сжатие образующейся плазмы в таких устройствах осуществляется системой ударных волн (УВ), циркулирующих в ее объеме, и стальных оболочек, сходящихся к центру под действием продуктов взрыва (ПВ) мощного конденсированного взрывчатого вещества (ВВ). Этот процесс получил название квазиизэнтропического, так как после прохождения первой УВ дальнейшее сжатие плазмы происходит при существенно меньшем нагреве, чем в случае однократного сжатия, и при более длительном удержании вещества в сжатом состоянии. Целью такого эксперимента является регистрация $R(t)$ -траектории движения оболочек нагружающего устройства и определение размера внутреннего каскада в момент его «остановки», когда достигается максимальное сжатие исследуемого вещества. Особенность конструкций [24, 25] состоит в возможности локализации металлогазовой смеси, возникающей при выбросе частиц металлической пыли [26, 27], что не позволяет ей проникать во внутреннюю полость, где измеряется сжимаемость исследуемой плазмы. Для снижения возмущений от системы инициирования в таких устройствах между ВВ и цилиндрическим устройством использовали прокладку из оргстекла с электроконтактными датчиками на ее границах для контроля за движением УВ.

Схема экспериментов неоднократно приводилась в наших работах, см, например, [24, 25]. Для регистрации положения оболочек, сжимающих исследуемое вещество, использовано жесткое рентгеновское излучение трех бетатронов БИМ234.3000 [28] с граничной энергией электронов 60 МэВ, позволяющих просвечивать объекты с массовой толщиной до 230 г/см^2 , что примерно эквивалентно толщине 20 см свинца. Экспериментальное устройство с гелием размещалось перед бетонным сооружением, в котором смонтированы бетатроны. Особенностью бетатронов ВНИИЭФ является их возможность работать в режиме последовательной генера-

ции трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. Это позволяет в эксперименте зарегистрировать одновременно до девяти фаз сжатия плазмы. В опытах использована оптико-электронная система детектирования, которая активируется синхронно с импульсами бетатрона. В качестве преобразователей рентгеновского излучения в видимое использованы монокристаллы йодистого натрия и силикат лютеция. Для устранения влияния рассеянного излучения на высокочувствительные детекторы размер поля регистрации в каждой из проекций ограничен свинцовыми коллиматорами. Для защиты бетатронов и оптико-электронных регистраторов рентгеновского излучения применены алюминиевые конусы.

При сохранении массы сжатого вещества его плотность вычисляли из выражения

$$\rho = \rho_0 (R_0/R_{\min})^n,$$

где ρ_0 — начальная плотность газа, R_0 и $R_{\min}$ — внутренние радиусы оболочки в исходном состоянии и в момент ее «остановки» соответственно, $n = 2$ для цилиндрической геометрии. Давление сжатой плазмы гелия получено на основе газодинамических расчетов, учитывающих реальные характеристики экспериментальных устройств.

Характеристики устройств и условия проведения опытов приведены в табл. 1. Геометрия экспериментальных устройств показана на рис. 1.

Заполнение камеры гелием производилось от термокомпрессора. Величина давления в процессе заполнения измерялась датчиком с классом точности 0.25. Температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газов. Давление газа He1 и He2 в полостях оболочек 1 и 2 было одинаковым. Окончательно плотность гелия вычислялась с учетом его сжимаемости на основании известных табличных данных [29].

В данной работе геометрия экспериментальных устройств выбиралась таким образом, чтобы получить равномерный профиль давления по радиусу, $P(R)$, при максимальном сжатии плазмы гелия. Для снижения кумуляции энергии в эксперименте №1 в конструкции работы [25] вдоль оси установлен металлический цилиндрический стержень. При наличии стержня отраженная УВ формируется на границе R^* , где R^* — радиус стержня. Тем самым уменьшается амплитуда отраженной УВ, снижается геометрическая кумуляция энергии и выравнивается распределение давления по радиусу полости со сжатой плазмой. Металлический стержень с начальным

Таблица 1. Характеристики устройств и условия проведения опытов. Здесь M_{expl} — масса ВВ, T_0 — температура газа, P_0 — давление, ρ_0 — плотность

№ опыта	$R_{орг}$, мм	M_{expl} , кг	R^* , см	r_{02} , см	R_{02} , см	T_0 , °C	P_0 , атм	ρ_0 , г/см ³
1	100	24	0.45	4.1	4.5	25.6	255.7	0.0363
2	122.5	18	—	3.0	3.4	19.6	245.5	0.0361
3	100	24	—	3.0	3.4	6.3	236.6	0.0359
4	100	24	—	3.4	3.78	22.25	243.6	0.0356
5	93.5	22	—	5.0	5.4	10.3	255	0.0378

Примечание. Здесь прочерк означает отсутствие стального стержня в конструкциях. Масса ВВ указана в тротиловом эквиваленте. В опыте №4 внутренняя оболочка изготовлена из сплава ВНЖ-95 (95% вольфрама, 3.5% никеля и 1.5% железа).

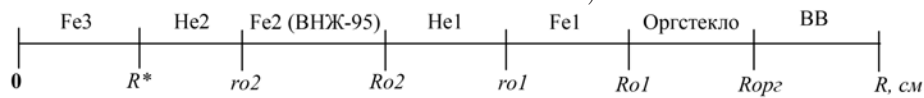


Рис. 1. Геометрия цилиндрического экспериментального устройства в экспериментах с гелием. Здесь R^* — радиус стального стержня, $r_{01} = 7.1$ см и $R_{01} = 7.5$ см — внутренний и наружный радиусы оболочки первого каскада (Fe1) соответственно, r_{02} и R_{02} — радиусы оболочки второго каскада (Fe2), $R_{орг}$ — внешний радиус оболочки из оргстекла, 1 и 2 — состояния гелия в наружной и внутренней полостях устройства соответственно

радиусом $R^* = 0.45$ см изготовлен из стали. В последующих экспериментах №2, №3, №4 и №5 стержень отсутствовал, а задача создания равномерного профиля давлений в сжатой плазме гелия решалась путем тщательного расчетного выбора геометрии экспериментальных устройств.

Впервые в практике подобных исследований в эксперименте №5 использована конструкция из работы [25], внутри которой (рис. 2) разместили оптоволоконно диаметром 400 мкм (1) для регистрации излучения с фронта цилиндрической УВ, PDV-датчик (2) для измерения скорости движения границы внутренней оболочки цилиндрического устройства и минизеркала (3) диаметром 5 мм для передачи информации в каждом канале регистрации.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Опыт №1. В опыте зарегистрированы 9 фаз сжатия гелия. Типичные изображения сжатых полостей в четыре момента времени приведены на рис. 3. Там же показаны результаты трассировки сжатой полости с гелием. Обработка экспериментальных рентгенограмм выполнена функциональным методом из работы [30]. Здесь и далее времена отсчитываются от подрыва детонаторов нагружающего устройства.

Расчет характеристик экспериментальных устройств выполнен по одномерной газодинамической программе [31], предназначенной для численного моделирования неустановившихся

движений сплошной среды, тестированной по экспериментальным данным, полученным в России и за рубежом. В расчетах устройств гелий описывали табличным уравнением состояния (УРС) Хрусталева из библиотеки обменного фонда ВНИИЭФ.

Для всех областей железа использовали

- УРС ОСА [32] с откольной прочностью $\sigma_x = -4$ ГПа (хрупкий откол);
- дислокационную модель [33] с параметрами $C_t = 2.235$, $t_0 = 0.4$, $\tau_0 = 1.9$, $a = 30000$, $H = 0$.

Однофазное УРС железа [32] хорошо описывает ударную адиабату, но сглаживает фазовый $\alpha - \varepsilon$ -переход первого рода при $P \approx 13$ ГПа. Расчеты с учетом фазового перехода в железе по УРС из работы [34] не привели к существенному изменению результатов. Область ВВ–ПВ описывали упрощенным уравнением состояния в форме Зубарева [35].

Сравнение экспериментальных данных, полученных в опыте №1, и $R(t)$ -траекторий, рассчитанных с использованием для гелия УРС ВНИИЭФ, показано на рис. 4а. Фрагмент $R(t)$ -диаграмм вблизи момента максимального сжатия приведен на рис. 4б, на котором, как и ранее [36], показана также структура двадцати УВ, циркулирующих в плазме гелия и стальном стержне.

Подбор параметров расчетной схемы экспериментальной конструкции для этого и последующих экспериментов проводился по результатам тестирования движения УВ с помощью электроконтакт-

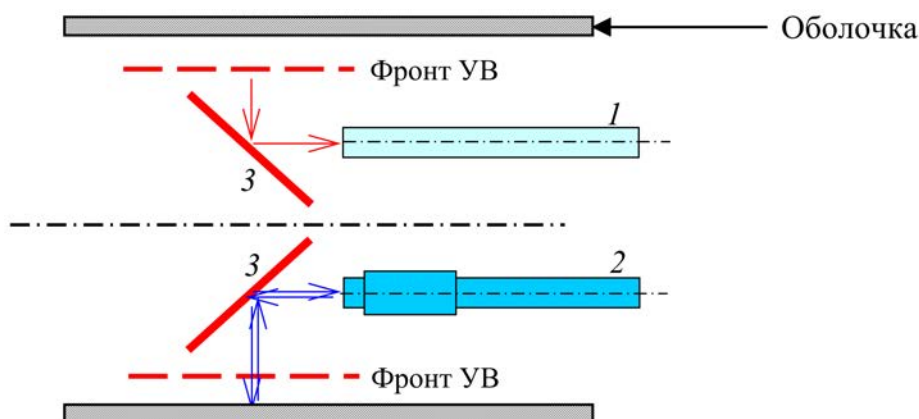


Рис. 2. Схема регистрации свечения фронта УВ и скорости движения границы оболочки:

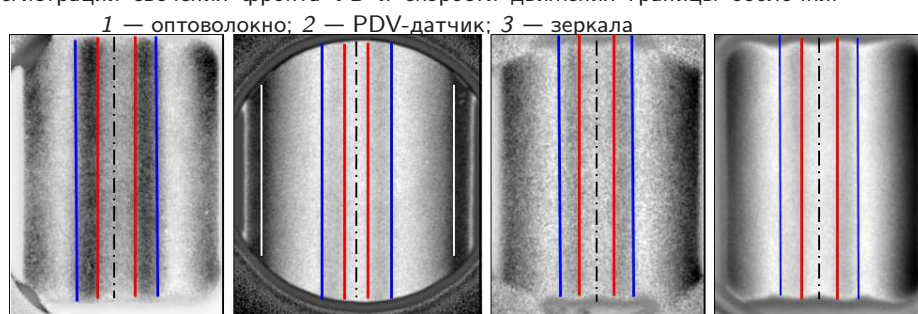


Рис. 3. (В цвете онлайн) Типичные рентгенограммы и результаты трассировки оболочек с плазмой гелия в эксперименте №1: красные линии — границы стержня (сталь); синие — внутренняя граница оболочки второго каскада (ВГО-2); белые — наружная граница оболочки второго каскада (НГО-2)

ных датчиков, расположенных на границах оболочки из оргстекла (точки в виде светлых квадратов). На рис. 4а видно, что расчет с использованием выбранной тактики счета хорошо описывает контрольные точки (р. 1 и р. 2) движения УВ по оболочке из оргстекла и стальной оболочки первого каскада Fe1, а также измеренные рентгенографическим методом значения радиусов границ внешней и внутренней оболочек второго каскада Fe2 экспериментального устройства. Данные расчета воспроизводят также динамику границы оболочки стального стержня Fe3. На рис. 4б видно, что первая УВ в момент времени F достигает центра устройства и отражается, а в момент K контакта отраженной УВ с внутренней границей оболочки Fe2 плазма оказывается уже дважды (квазиизэнтропически) сжатой. С учетом дополнительного сжатия плазмы оболочкой, кумуляции термодинамических параметров за фронтом сходящейся УВ и ее поглощения последующими волнами на этапе движения к центру устройства, в некоторый момент времени между F и K начинается квазиизэнтропическое сжатие плазмы. Поэтому, начиная с состояния K и во все последующие моменты времени, получаемые эксперименталь-

ные данные можно отнести к результатам измерения квазиизэнтропической сжимаемости.

Для всех девяти фаз сжатия, зарегистрированных в опыте, были выполнены расчеты термодинамических параметров $P(R)$, $\rho(R)$ и $T(R)$ в плазме гелия, которые приведены в табл. 2.

Из анализа полученных данных следует, что примерно с четвертой фазы сжатия распределение давления в плазме гелия по радиусу становится практически равномерным вплоть до последней (9) фазы рентгенографирования. Рассчитанные профили давления $P(R)$ для фаз рентгенографирования 4–9 приведены на рис. 5.

Опыт №2. В данном эксперименте использовано двухкаскадное цилиндрическое устройство без центрального стержня. Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных для этого эксперимента показано на рис. 6, а профиль давления при максимальном сжатии плазмы гелия — на рис. 7. В эксперименте №2 плазма гелия была сжата до плотности $\rho = 2.30 \text{ г/см}^3$ давлением $P = 376 \text{ ГПа}$ при температуре $T = 19700 \text{ К}$.

Таблица 2. Параметры плазмы гелия в различных фазах сжатия в эксперименте №1

№ фазы	t , мкс	R_{env} , см	R_{bar} , см	P , ГПа	ρ_{exp} , г/см ³	ρ_{calc} , г/см ³	T , К
1	47.34	1.077	0.437	23.08	0.62	0.66	7864
2	48.00	0.866	0.419	49.61	1.05	0.877	8078
3	48.43	0.743	0.379	127	1.48	1.390	15207
4	48.81	0.696	0.376	218	1.76	1.744	19220
5	49.20	0.673	0.361	256	1.87	1.880	20039
6	49.58	0.718	0.371	245	1.59	1.868	18746
7	49.94	0.729	0.375	216.5	1.54	1.778	17620
8	50.29	0.731	0.360	167	1.49	1.586	16102
9	50.59	0.81	0.388	138	1.19	1.466	14839

Примечание. R_{env} и R_{bar} — внутренний радиус оболочки второго каскада и радиус стержня соответственно

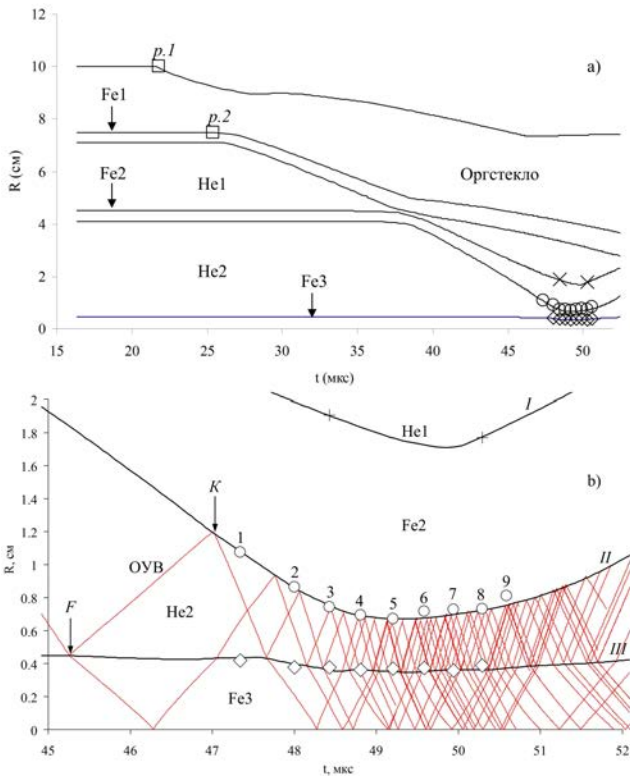


Рис. 4. а) Экспериментальные данные и рассчитанные $R(t)$ -диаграммы: $\square$ — электроконтактная методика; $\diamond$, $\circ$, $+$, $\times$ — данные рентгенографического эксперимента; б) фрагмент $R(t)$ -диаграмм вблизи момента максимального сжатия: цифры 1–9 — фазы сжатия, расчеты НГО-2 (I), ВГО-2 (II) и наружной границы стального стержня Fe3 (III); F — фокусировка УВ; K — момент прихода отраженной УВ (ОУВ) на ВГО-2

Опыт №3. В данном эксперименте использовано то же двухкаскадное цилиндрическое устройство, как и в опыте №2, но с большей массой ВВ (см. табл. 1). Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных для этого эксперимента показана на рис. 8а, а вблизи максимального сжатия — на рис. 8б. В эксперименте №3 плазма гелия была сжата до плотности $\rho = 2.44$ г/см³ давлением $P = 476$ ГПа при температуре $T = 22300$ К.

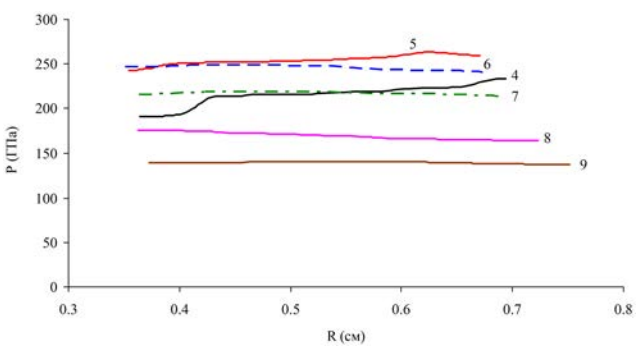


Рис. 5. Профили давления (расчет) в плазме гелия для шести фаз 4–9 рентгенографирования в опыте №1

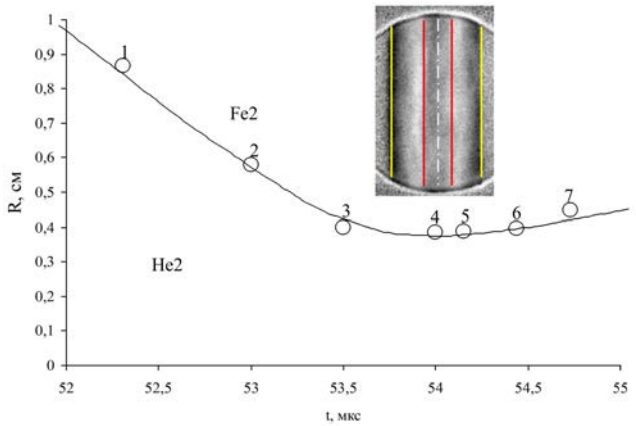


Рис. 6. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных в опыте №2. Эксперимент: $\circ$ — движение ВГО-2. Сплошная линия — расчет. Показаны фрагмент рентгенограммы на момент времени $t = 54$ мкс и результаты функциональной обработки: желтые линии — НГО-2; красные — ВГО-2

но на рис. 8а, а вблизи максимального сжатия — на рис. 8б. В эксперименте №3 плазма гелия была сжата до плотности $\rho = 2.44$ г/см³ давлением $P = 476$ ГПа при температуре $T = 22300$ К.

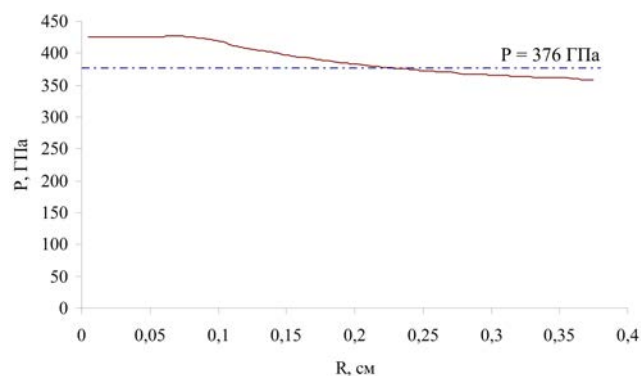


Рис. 7. Профиль давления в плазме гелия при максимальном сжатии в опыте №2: сплошная линия — расчет; стрихпунктирная линия — усредненное по массе значение давления при максимальном сжатии

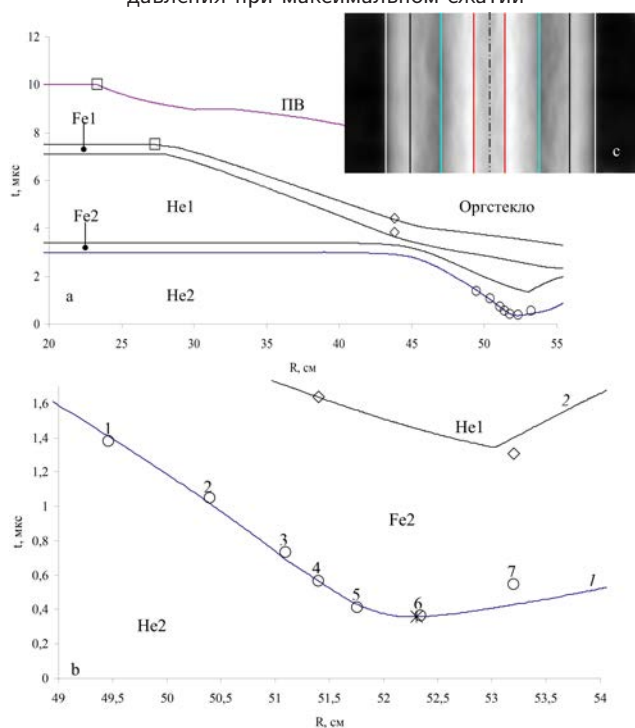


Рис. 8. а) Экспериментальные данные в опыте №3 и рассчитанные $R(t)$ -диаграммы: $\square$ — электроконтактная методика; $\diamond$, $\circ$ — рентгенографическая методика; б) фрагмент $R(t)$ -диаграмм вблизи момента максимального сжатия; в) фрагмент рентгенограммы на момент времени $t = 51,4$ мкс. Сплошные линии — расчет: 1 — НГО-2; 2 — ВГО-2; * — момент максимального сжатия

Опыт №4. Сравнение экспериментальных $R(t)$ -данных с результатами расчета показано на рис. 9. В расчете для ВНЖ-95 использовали УРС в форме Ми–Грюнаизена, построенное по данным работы [37]. Распределение давления по радиусу в сжатой плазме гелия показано на рис. 10. Видно, что тщательный выбор параметров экспериментального

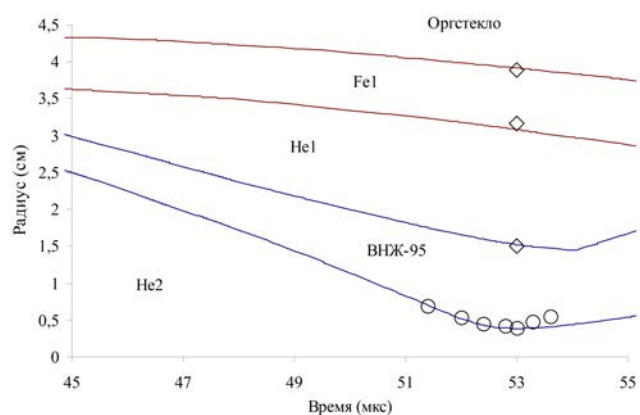


Рис. 9. Сравнение $R(t)$ -данных, полученных в эксперименте №4, с результатами расчета. Эксперимент: $\circ$ — движение ВГО-2 (ВНЖ-95); $\diamond$ — результаты для НГО-2 (ВНЖ-95), а также для НГО-1 и ВГО-1 (Fe1). Сплошные линии — расчет

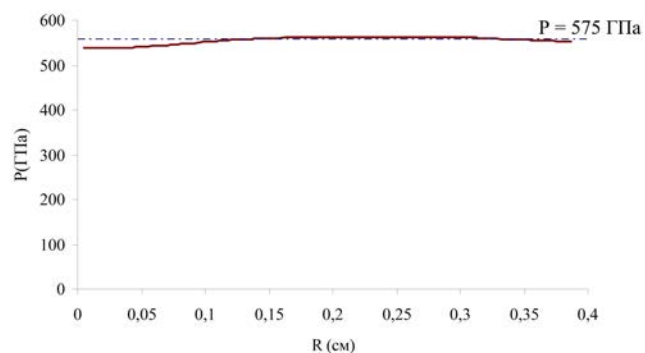


Рис. 10. Профиль давления при максимальном сжатии в сжатой плазме гелия в эксперименте №4: сплошная линия — расчет; стрихпунктирная линия — усредненное по массе значение давления при максимальном сжатии

устройства позволил получить практически равномерный профиль давления в сжатой плазме гелия.

В эксперименте №4 плазма гелия была сжата до плотности $\rho = 2,87 \text{ г/см}^3$ давлением $P = 577 \text{ ГПа}$ при температуре $T = 20842 \text{ К}$. На рис. 11 приведены фрагменты рентгенограмм опыта №4 в моменты времени $t_1 = 52,82$ мкс и $t_2 = 53,01$ мкс с результатами трассировки по методике из работы [30]. Отметим, что на момент времени t_2 приведен фрагмент панорамной рентгенограммы, полученной с применением пакета из десяти сложенных вместе фотохромных экранов, что позволило зарегистрировать положение всех границ экспериментального устройства.

Опыт №5. В данном экспериментальном устройстве кроме сжимаемости регистрировали скорость движения границы оболочки второго

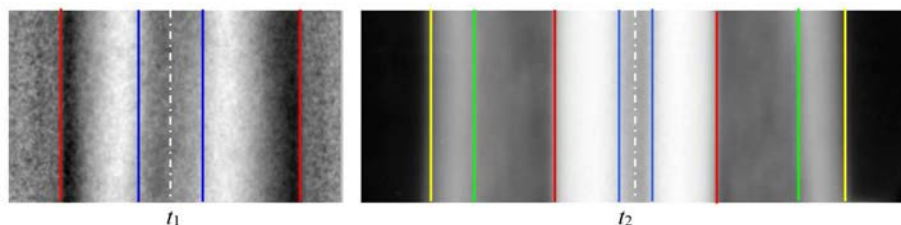


Рис. 11. (В цвете онлайн) Фрагменты рентгенограмм в эксперименте №4 в моменты времени t_1 и t_2 . Оболочка из сплава ВНЖ-95: синие линии — ВГО-2; красные — НГО-2. Оболочка Fe1: зеленые — ВГО-1; желтые — НГО-1

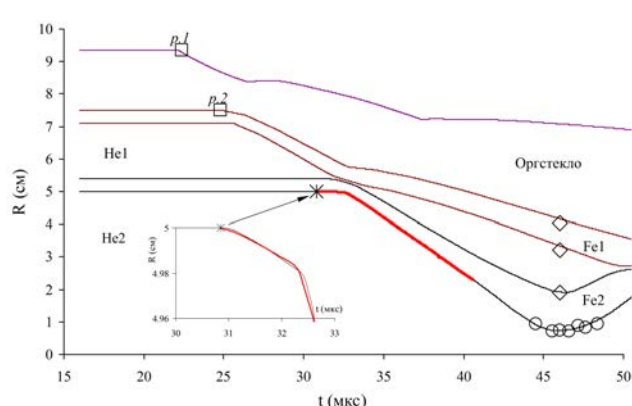


Рис. 12. (В цвете онлайн) Сравнение $R(t)$ -данных, полученных в эксперименте №5, с результатами расчета. Эксперимент: $\square$ — данные с электроконтактных датчиков; результаты рентгенографирования: $\circ$ — ВГО-2; $\diamond$ — НГО-2, НГО-1 и ВГО-1; данные PDV-датчика: красная линия — экспериментальная $R(t)$ -траектория, $*$ — время выхода UV на границу $R = 5$ см. Сплошные черные линии — расчет

каскада PDV-датчиком, а также яркостную температуру гелиевой плазмы на фронте первой UV.

Сравнение экспериментальных $R(t)$ -данных с результатами расчета для этого устройства приведено на рис. 12.

На рис. 12 видно, что расчет с использованием выбранной тактики счета хорошо описывает контрольные точки ($p.1$ и $p.2$) движения UV по оргстеклу и стальной оболочке первого каскада Fe1, а также измеренные рентгенографическим методом траектории НГО-2 и ВГО-2 экспериментального устройства. Анализ данных показывает, что в эксперименте №5 плазма гелия была сжата до плотности $\rho_{exp} = 1.65 \text{ г/см}^3$ давлением $P = 240 \text{ ГПа}$ при температуре $T = 22388 \text{ К}$. Отличие экспериментальной плотности от рассчитанного значения ($\rho_{calc} = 1.75 \text{ г/см}^3$) составляет 6.7%. Ряд экспериментальных рентгенограмм, полученных в данном опыте, показан на рис. 13.

Экспериментальная диаграмма скорости $W(t)$ вместе с рассчитанной приведены на рис. 14, они хорошо согласуются друг с другом. Средняя

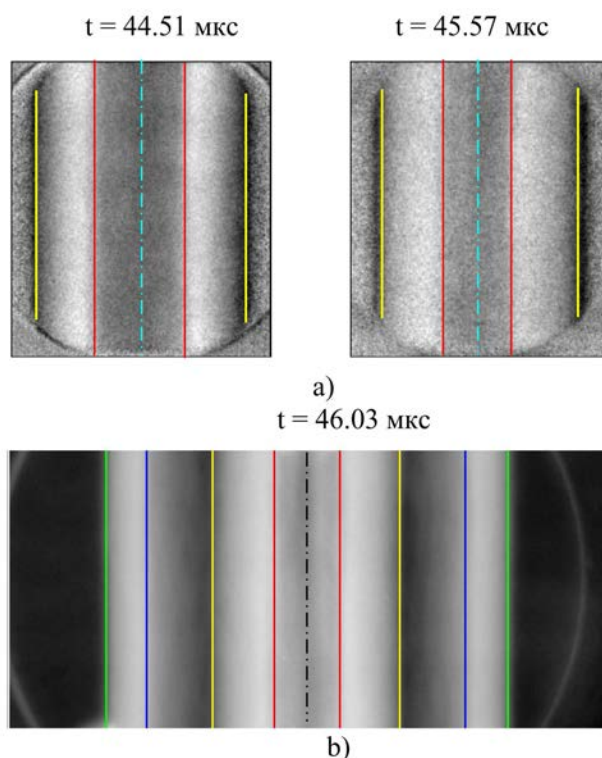


Рис. 13. (В цвете онлайн) Экспериментальные рентгенограммы: а) начальная фаза движения; б) панорамное изображение полостей устройства при максимальном сжатии. Цветными линиями обозначены границы полостей: красные линии — ВГО-2; желтые — НГО-2; синие — ВГО-1; зеленые — НГО-1

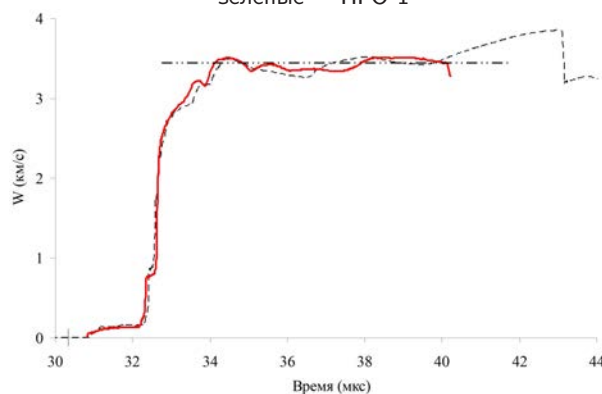


Рис. 14. Скорость движения внутренней границы оболочки экспериментального устройства: сплошная линия — экспериментальная зависимость; штриховая — расчет; штрих-пунктирная — среднее значение $W(t) = 3.45 \text{ км/с}$

скорость движения оболочки Fe2 в интервале времен $dt = 34\text{--}40$ мкс оценивается значением $W = 3.45$ км/с.

В эксперименте №5 в качестве регистратора излучения с фронта цилиндрической УВ использован фотодиод ФД254 в комплексе с высокоскоростным осциллографом. Излучение регистрировалось в полосе пропускания фотодиода $\Delta\lambda = 334\text{--}1140$ нм при средней длине волны $\lambda = 775$ нм. Предварительно измерительная линия была откалибрована с использованием источника абсолютно черного тела с температурой $T = 1770$ К. Типичная осциллограмма излучения фронта УВ, зарегистрированная в эксперименте, приведена на рис. 15а, по которой, с учетом калибровочных данных, рассчитана зависимость яркостной температуры на фронте УВ от времени в плазме гелия (рис. 15б). Значения текущих температур на фронте УВ в плазме гелия в наиболее характерных точках, указанных стрелками, приведены в подписях к рисунку.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ

Как следует из рис. 15б, при чувствительности нашей методики $T_{min} = 2500$ К регистрация температуры фронта УВ начинается в момент времени $t_0 \approx 40.2$ мкс (точка 1). За время $dt \approx 0.6$ мкс температура возрастает до $T \approx 6000$ К (т. 4), после чего в течение короткого времени $dt \approx 0.2$ мкс происходит рост температуры до $T \approx 11000$ К (т. 6) и последующий спад. Проведенный анализ полученных данных показал, что этот спад температуры связан со спецификой конструкции канала регистрации излучения с фронта УВ.

Рассмотрим процесс формирования мощной первой УВ и ее циркуляции в области исследуемого вещества, показанные на рис. 16. Как видно на рис. 16а, после ряда отражений первой УВ SW1 в слое гелия He1 в полости He2 формируется суммарная УВ SW⁺, которая в момент начала свечения фронта $t_1 \approx 40.2$ мкс (т. 1) находится на радиусе $R \approx 8$ мм (рис. 16б). При дальнейшем движении УВ SW⁺ к оси устройства амплитуда свечения фронта УВ нарастает и к моменту времени $t_2 \approx 41$ мкс (т. 2) достигает своего максимального значения. К этому же времени УВ SW⁺ физически достигает отражающей грани минизеркала диаметром 2.5 мм, а затем зоны расположения оптоволокну (т. 3). Снижение амплитуды излучения с этого момента может быть связано с повреждением поверхности зеркала и (или) световода ударной волной.

Экспериментальные значения текущих температур на фронте УВ в зависимости от времени движения УВ SW⁺ показаны на рис. 17 в сравнении с результатами расчета (кривая 1). Также на рис. 17 приведена рассчитанная зависимость усредненных по массе температур (кривая 2), на которую нанесены значения температур в плазме гелия в моменты рентгенографирования.

Пиковые значения температур на фронте УВ в моменты F1–F5 связаны с фокусировкой УВ на оси экспериментального устройства, рассчитанная циркуляция которых показана на рис. 16б. Как видно на этом рисунке, в момент времени F1 суммарная УВ SW⁺ достигает центра устройства. В результате последующих отражений УВ SW⁺ от границы сходящейся к центру оболочки Fe2 в состояниях K1–K4 происходит кумуляция энергии в этом и последующих состояниях F2–F5, сопровождающаяся резким изменением температуры плазмы гелия на оси устройства $T \approx 44000, 78000, 73000, 63000, 58000$ К. После достижения максимального значения в состоянии F2 рост пиковых значений температур замедляется. В той фазе движения, пока УВ не достигнет центра устройства, реализуется процесс УВ-сжатия и, как видно на рис. 17, температуры на фронте УВ и усредненные по массе практически совпадают до $t \approx 40$ мкс.

Как было показано выше на рис. 14, осциллограмма с PDV-датчика демонстрирует практически постоянную скорость движения внутренней границы оболочки второго каскада (ВГО-2) до $t \approx 40$ мкс. Это позволяет сделать вывод, что до $T \approx 4000$ К не происходит образования плотного слоя плазмы, способного экранировать зондирующее лазерное излучение, используемое в гетеродин-интерферометре [38].

Результаты по сжимаемости плазмы гелия, полученные в пяти экспериментах настоящей работы, приведены в $P(\rho)$ -координатах на рис. 18 и демонстрируют хорошее согласие в исследованной области давлений с данными работы [23]. Там же приведены расчеты «холодной» ($T = 0$ К) адиабаты и изэнтропы, описывающей экспериментальные данные.

На плоскости $P(T)$ данные настоящей работы показаны на рис. 19 вместе с результатами работы [23] и расчетами из работы [7].

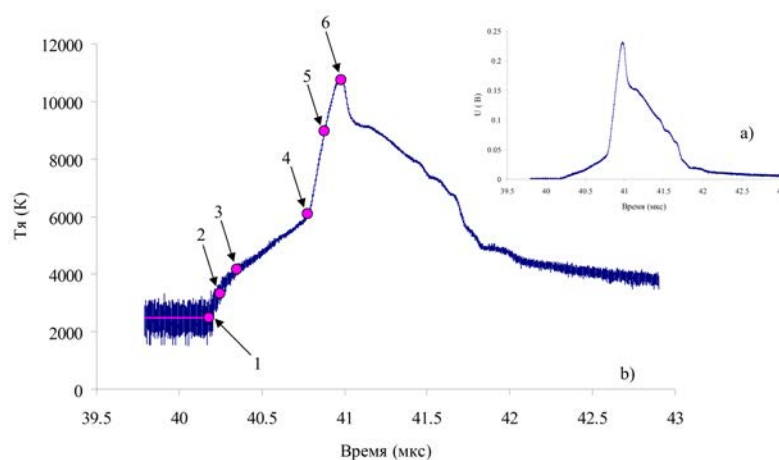


Рис. 15. Зарегистрированная осциллограмма (а) и яркостная температура на фронте УВ в плазме гелия (b) в зависимости от времени при $T = 2500$ (1), 3342 (2), 4190 (3), 6083 (4), 8954 (5), 10743 (6) К

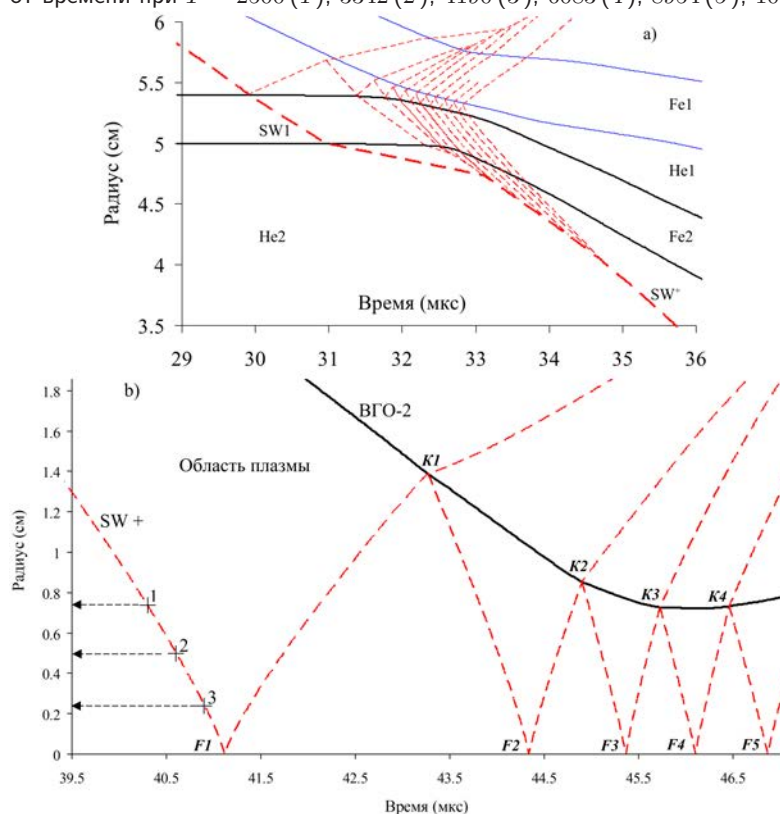


Рис. 16. (В цвете онлайн) а) Траектории УВ в начальной фазе: SW1 — первая УВ; SW⁺ — суммарная УВ; Fe1 и Fe2 — оболочки первого и второго каскадов. б) $R(t)$ -диаграммы: сплошная линия — траектория ВГО-2; красные штрихи — траектории УВ SW⁺; F1–F5 — моменты фокусировки УВ SW⁺; K1–K4 — моменты отражения УВ SW⁺ от ВГО-2

5. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С РЕЗУЛЬТАТАМИ РАСЧЕТА ПО МОДЕЛИ SANA И ПОДХОДА *AB INITIO* В РАМКАХ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В рамках теоретического сопровождения экспериментов ВНИИЭФ и сравнения различных

теоретических подходов помимо расчетов с УРС ВНИИЭФ в данной работе были проведены дополнительные расчеты термодинамических параметров ударно-сжатой плазмы гелия при параметрах давления и плотности, достигнутых в настоящем эксперименте. Для этой цели, как и ранее [22, 36], использовались два подхода: традиционный метод

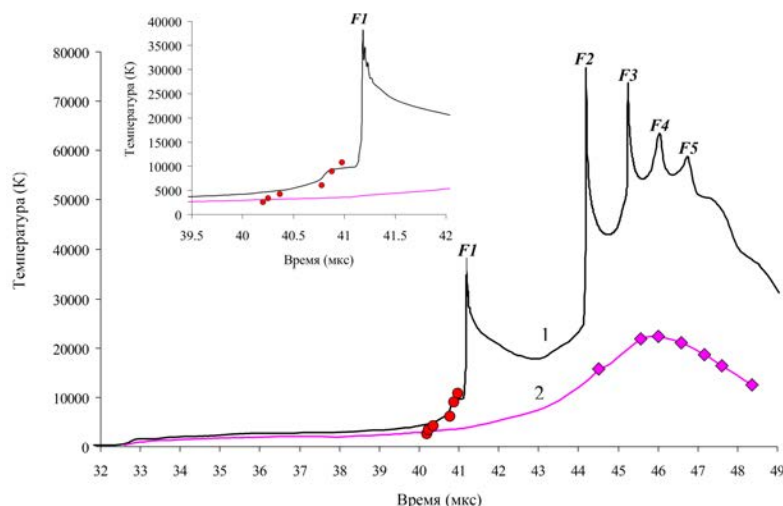


Рис. 17. Сравнение экспериментальных данных с рассчитанной зависимостью температуры на фронте цилиндрической УВ (кривая 1) от времени. Эксперимент: кружки — $\lambda = 775$ нм. Расчет: кривая 2 — усредненная по массе температура в плазме гелия в зависимости от времени; ромбы — усредненные по массе значения температур в моменты рентгенографирования. На вкладке — область диаграммы вблизи фокусировки первой УВ

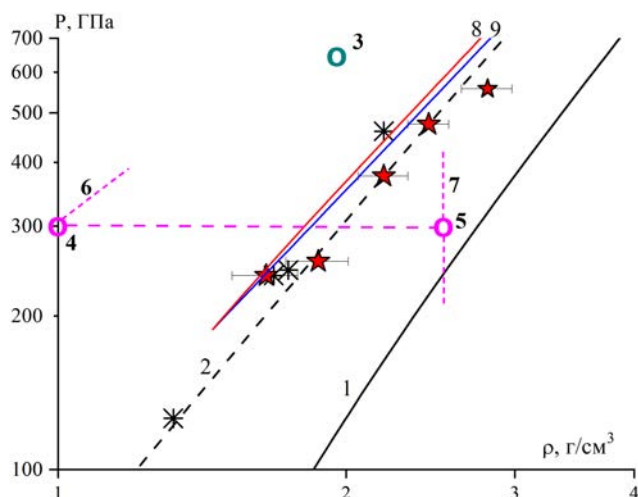


Рис. 18. (В цвете онлайн) Сжимаемость неидеальной плазмы гелия. Эксперимент: * — [23]; красные звездочки — настоящая работа. Расчет: 1 — изотерма $T = 0$ K; 2 — изэнтропа $S/R = 11.55$ (УРС ВНИИЭФ); 3 — критическая точка (660 ГПа, 2 г/см^3 , 35000 K) [7]; 4, 5 — границы участка изотермы-изобары $T \approx 8000 \text{ K} \Leftrightarrow P \approx 300 \text{ ГПа}$ в двухфазной зоне фазового перехода [7]; 6 и 7 — части границ «купола» двухфазной области [7] со стороны атомарной (6) и плазменной (7) областей; 8 и 9 — изэнтропы плазмы гелия, выходящие из единой точки $\{\rho = 1.45 \text{ г/см}^3, P = 188 \text{ ГПа}\}$, рассчитанные согласно УРС SAHA и УРС QMD соответственно

расчета состава и термодинамических функций неидеальной многократно ионизованной плазмы в рамках «Химической модели плазмы» (chemical picture), реализованной в коде SAHA [3, 19], а также расчет в рамках современного подхода

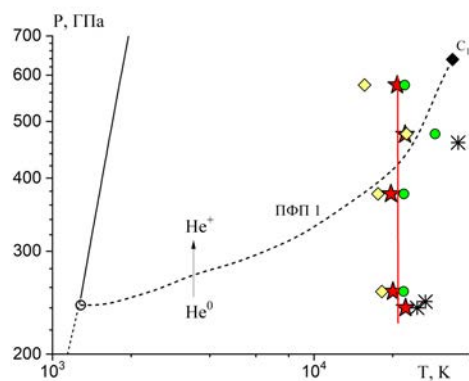


Рис. 19. (В цвете онлайн) Термодинамические параметры неидеальной плазмы гелия: * — [23]; красные звездочки — настоящая работа; красная линия — средняя изотерма 21045 K; штрихи — граница плазменного фазового перехода из атомарного состояния гелия в состояние однократно ионизованной плазмы [7]; черный ромб — критическая точка плазменного фазового перехода [7]; O — гипотетическая тройная точка [7]; желтые ромбы — расчет температуры (см. табл. 3) в химической модели (код SAHA); зеленые кружки — то же с использованием УРС QMD (код VASP с функционалом PBE [36])

ab initio — квантовой молекулярной динамики (QMD) [39]. Процедура расчетов QMD реализована с использованием известного пакета VASP [40] с обменно-корреляционным функционалом с использованием обобщенно-градиентного приближения (GGA) с параметризацией PBE [41]. Конкретно, в нашей настоящей работе были проведены

следующие расчеты.

1) Для всех экспериментальных точек $\{P_i, \rho_i\}_{exp}$ в рамках моделей SAHA и QMD были рассчитаны соответствующие этим моделям значения температур $\{T_i\}$. Пользуясь методическим достоинством модели SAHA, с помощью этого кода мы рассчитали также ряд дополнительных физически значимых характеристик термодинамических состояний $\{P_i, \rho_i, T_i\}$, соответствующих в рамках модели SAHA экспериментально достигнутому параметрам $\{P_i, \rho_i\}_{exp}$, а именно, равновесные степени ионизации гелия, фактор сжимаемости $(P_i V_i / R T_i)$, характеризующий знак и величину степени неидеальности плазмы в целом, показательный («дебаевский») параметр кулоновской неидеальности $\Gamma_D = e^2 / k T r_D$ (r_D — дебаевский радиус с учетом многократной ионизации и частичного вырождения электронного газа) и, наконец, параметр квантового вырождения электронного газа $n_e \lambda_e^3$.

2) Также в рамках обоих подходов были рассчитаны параметры показательной изэнтропы, «выпущенной» из одной и той же начальной точки $\{\rho = 1.45 \text{ г/см}^3, P = 188 \text{ ГПа}\}$, для сравнения с приведенной на рис. 18 изэнтропой, рассчитанной с использованием УРС ВНИИЭФ.

Для обоих указанных альтернативных расчетов термодинамики гелия, SAHA и QMD, в настоящей работе использовались численные методики и реализующие их расчетные коды, уже неоднократно использовавшиеся в недавних работах [22, 36], где подробно описаны важнейшие особенности двух указанных альтернативных методик. По этой причине более подробное описание опущено в настоящей работе. Все указанные выше величины, рассчитанные как кодом SAHA, так и в рамках модели QMD (код VASP с функционалом PBE), вместе с экспериментальными данными приведены в табл. 3, а также на рис. 18 и 19 в $P(\rho)$ - и $P(T)$ -плоскостях. Эти результаты демонстрируют хорошее согласие в исследованной области давлений как друг с другом, так и с экспериментальными данными работы [23].

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ СРАВНЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ВНИИЭФ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Результаты по сжимаемости плазмы гелия в $P(\rho)$ -координатах, полученные в пяти экспериментах настоящей работы, приведены на рис. 18 и демонстрируют хорошее согласие в исследованной области давлений с данными работы [23]. Там же пред-

ставлен расчет с использованием УРС ВНИИЭФ изотермы $T = 0 \text{ К}$ и изэнтропы, наилучшим образом описывающей экспериментальные данные. Также на рис. 18 приведены результаты сравнительного расчета согласно УРС SAHA и УРС QMD для изэнтропы, выпущенных из единой точки с координатами $\{\rho = 1.45 \text{ г/см}^3, P = 188 \text{ ГПа}\}$, и показаны доступные параметры границы первой стадии гипотетического ПФП, предсказанного в [7]. Из приведенного на рис. 18 сравнения можно заключить, что все три рассчитанные изэнтропы имеют разный наклон, т. е. предсказывают различную скорость звука. Наиболее «жестким» является УРС ВНИИЭФ, более «мягким» оказывается УРС SAHA и наиболее «мягким» — УРС QMD. Следует еще раз подчеркнуть, что все три теоретические УРС, используемые в данной статье, не содержат в области параметров, представленных на рис. 18, никаких аномалий типа фазовых переходов, как это предсказывает теория [7]. При этом все три изэнтропы большей своей частью проходят глубоко в пределах гипотетической двухфазной области, предсказываемой теоретической моделью [7] (см. зону в границах 3, 4, 5, 6, 7), где по существующим представлениям равновесные изэнтропы должны иметь существенно меньшую скорость звука, т. е. существенно меньшую «крутизну» в принятых на рис. 18 координатах [42]. Ввиду сказанного можно рассматривать большую величину наклона серии экспериментальных точек как аргумент в пользу отсутствия фазового разрыва в представленной зоне фазовой диаграммы.

На рис. 19 экспериментальные данные настоящей работы показаны на плоскости $P-T$ вместе с результатами работы [23]. Помимо этого, на рис. 19 представлены температуры $\{T_i\}$ в точках $\{P_i, \rho_i\}_{exp}$, рассчитанные по теоретическим моделям УРС SAHA и QMD.

Сравнение представленных на рис. 19 результатов расчета температуры, полученных с помощью трех принципиально различных теоретических подходов, позволяет сделать следующие выводы.

1. Все три варианта набора температур, соответствующих экспериментальным точкам $\{P_i, \rho_i\}_{exp}$, близки друг другу и в хорошем приближении соответствуют изотермическому характеру всей совокупности точек с несущественно различающейся величиной средней температуры. Однако следует признать, что все три варианта УРС (ВНИИЭФ, SAHA и QMD) исходно и не предполагают никаких фазовых аномалий в зоне экспериментально исследованных параметров.

Таблица 3. Расчетные и экспериментальные параметры плазмы гелия в фазе максимального сжатия

Эксперимент	УРС ВНИИЭФ				УРС SANA					УРС QMD	
	$\rho_{exp},$ г/см ³	$P_{calc},$ ГПа	$T_{calc},$ К	$\frac{P}{\rho RT}$	$T_{calc},$ К	$\frac{n_i}{n_i + n_a}$	Γ_D	$n_e \lambda_e^3$	$\frac{P}{\rho RT}$	$T_{calc},$ К	$\frac{P}{\rho RT}$
1	1.87	256	20039	3.27	18175	$5.59 \cdot 10^{-4}$	1.758	$2.67 \cdot 10^{-2}$	3.61	21997	2.97
2	2.30	376	19700	3.99	17564	$5.66 \cdot 10^{-4}$	2.059	$3.48 \cdot 10^{-2}$	4.48	22079	3.56
3	2.44	476	22300	4.20	22561	$9.06 \cdot 10^{-3}$	5.828	$4.06 \cdot 10^{-1}$	4.16	29081	3.22
4	2.87	577	20842	4.64	15606	$3.05 \cdot 10^{-4}$	2.015	$2.79 \cdot 10^{-2}$	6.20	22235	4.35
5	1.65	240	22388	—	—	—	—	—	—	—	—

2. Наиболее весомый аргумент в пользу отсутствия первого из предсказанных [7] обширных плазменных (ionization-driven) фазовых переходов следует из анализа самого факта фиксации представленных на рис. 18 равновесных состояний плазмы гелия в переменных давление–плотность. Напомним, что плотность плазмы непосредственно измеряется в эксперименте, в то время как достоверность рассчитанных величин давления, строго говоря, подкрепляется лишь хорошим совпадением измеренных и рассчитанных (с помощью не содержащего температуру калорического УРС ВНИИЭФ $U(P, \rho)$) основных измерявшихся кинематических параметров процесса квазиизэнтропического сжатия, т. е. $R(t)$ - и $W(t)$ -траекторий сжатия, представленных на рис. 5–10. Дело в том, что, как уже подчеркивалось выше, каждая экспериментальная точка, приведенная на рис. 18 и 19 и в табл. 2 и 3, в реальности является финалом цепочки равновесных состояний, реализующихся в процессе реверберации последовательности ударных сжатий при квазиизэнтропическом достижении состояния максимального сжатия. Примером такой цепочки является серия состояний сжатия 1–5 эксперимента №1 в табл. 2. При этом в самой идеологии метода квазиизэнтропического сжатия [43–45] подразумевается, что все обсуждаемые промежуточные состояния на пути к состоянию максимального сжатия являются равновесными и, следовательно, оправдывающими применение двух фундаментальных инструментов теоретического описания процесса квазиизэнтропического сжатия — приближения локального термодинамического равновесия и локального гидродинамического описания. Но в том-то и состоит обсуждаемая особенность гипотетического плазменного фазового перехода [7] по отношению к на-

стоящему эксперименту, что для всех экспериментальных точек, приведенных в табл. 3, все состояния обсуждаемых цепочек ударных сжатий и состояния максимального сжатия оказываются (согласно УРС ВНИИЭФ и расчетам работы [7]) попадающими на фазовой диаграмме $P-\rho$ внутрь двухфазной области проверяемого фазового перехода [7] и даже, по-видимому, внутрь «спинодальной» зоны этого фазового перехода, т. е. зоны абсолютной термодинамической неустойчивости вещества, для которой устойчивым равновесным состоянием является состояние двухфазной смеси, обладающей бесконечной изотермической сжимаемостью, $(\partial \rho / \partial P)_T = \infty$. Представляется достаточно убедительным, что динамика движения сжимающей оболочки в такой ситуации, когда сжимаемое вещество вследствие фазового превращения теряет свою «упругость», будет существенно иной, нежели в случае «обычного» однофазного состояния вещества с конечной сжимаемостью. Поэтому можно полагать, что в принятой в настоящем эксперименте диагностике движение сжимающей оболочки в случае фазового расслоения в сжимаемом веществе будет по своему характеру более походить на движение оболочки в специальных тестовых условиях сжатия «пустой» сборки, т. е. при отсутствии сжимаемого вещества в центральной камере, когда упругость этого вещества не препятствует свободному «схлопыванию» оболочек. Никаких признаков подобного поведения на $R(t)$ -диаграммах в настоящих экспериментах не зафиксировано. Это может считаться прямым доказательством отсутствия предсказанного [7] ионизационного фазового превращения в зоне изэнтропической полосы, перекрываемой «цепочками» многократно ударного сжатия настоящего эксперимента.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные в настоящей работе экспериментальные данные в $P(\rho)$ - и $P(T)$ -координатах не зафиксировали наличия в гелии аномалий, которые могли бы указывать на существование плазменного фазового перехода, предсказанного ранее теоретически Эбелингом [5], а также в работах [1–14], но и не позволяют сделать окончательного вывода о его отсутствии. Возможно, что область плазменного фазового перехода для сжатой плазмы гелия находится в диапазоне более высоких давлений, что обосновывает необходимость продолжения исследований.

Полученные экспериментальные данные показывают, что расчет с использованием для гелия УРС ВНИИЭФ адекватно описывает температуру сжатой плазмы на фронте цилиндрической УВ. С долей сдержанного оптимизма это позволяет утверждать, что температура плазмы гелия в момент максимального сжатия, рассчитанная с использованием УРС ВНИИЭФ, также вычисляется правильно.

В дальнейших исследованиях термодинамических параметров сжатой плазмы гелия авторы предполагают поднять диапазон исследований изотермически сжатой плазмы гелия до давлений 2500 ГПа, продолжить исследования излучательных характеристик фронта УВ и экспериментально зарегистрировать температуру плазмы гелия при максимальном сжатии, по крайней мере, в экспериментах с цилиндрическими устройствами.

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: С. Е. Елфимову, Е. В. Кулакову, А. С. Пупкову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. И. Гуркину, М. В. Логинову, Д. А. Линяеву, Г. С. Яндубаеву, В. В. Ерастову, В. В. Ковалдову. Авторы также выражают благодарность А. В. Шутову за плодотворные обсуждения проблемы динамического сжатия вещества при наличии в нем фазовых превращений.

Финансирование. Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Госкорпорации «Росатом» по Государственной программе развития техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии (РПТН) (проект «Исследование теплофизических свойств веществ при сжатии до рекордно высоких давлений и магнитных полей»), Российского фонда фундаментальных исследований (проект 20-02-00287), Министерства науки и высшего образования РФ в рамках программы по созданию молодежных лабораторий

(научная тема № FSWE-2021-0010 «Газодинамика и физика взрыва») и Национального центра физики и математики (г. Саров Нижегородской обл.).

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Iosilevskiy, V. Gryaznov, E. Yakub et al., *Contrib. Plasma Phys.* **43**, 316 (2003).
2. M. Schlanges, M. Bonitz, and A. Tschttschjan, *Contrib. Plasma Phys.* **35**, 109 (1995).
3. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *Термодинамика ударно-сжатой плазмы в квазитимическом представлении* / Энциклопедия низкотемпературной плазмы под общей ред. В. Е. Фортова. Том приложений III-1 / Ред. А. Н. Старостин и И. Л. Иосилевский, Физматлит, Москва (2004), сс. 111–139.
4. C. Winisdoerffer and G. Chabrier, *Phys. Rev. E* **71**, 026402 (2005).
5. W. Ebeling, *Contrib. Plasma Phys.* **30**, 553 (1990).
6. H. Hess, *High Press. Res.* **1**, 203 (1989).
7. В. Эбелинг, А. Фёрстер, В. Фортов и др., *Теплофизические свойства горячей плотной плазмы*, Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований (2007).
8. A. Forster, T. Kalbaum, and W. Ebeling, *High Press. Res.* **7**, 375 (1991).
9. В. Т. Швец, *ЖЭТФ* **143**, 182 (2013).
10. C. A. Seldam, *Proc. Phys. Soc. A* **70**, 97 (1957).
11. В. П. Трубицын, Ф. Р. Улинич, *ДАН СССР* **142**, 578 (1962).
12. D. A. Young, A. K. McMahan, and M. Ross, *Phys. Rev. B* **24**, 5119 (1981).
13. J. Meyer-ter-Vehn and W. Zittel, *Phys. Rev. B* **37**, 8674 (1988).
14. M. Preising and R. Redmer, *Contrib. Plasma Phys.* **61**, e202100105 (2021).
15. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., *ЖЭТФ* **142**, 696 (2012).
16. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., *Письма в ЖЭТФ* **96**, 172 (2012).
17. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., *ЖЭТФ* **146**, 169 (2014).
18. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., *Письма в ЖЭТФ* **101**, 575 (2015).

19. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* под ред. В. Е. Фортова и др., Наука, Москва (2000), с. 299.
20. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **151**, 592 (2017).
21. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
22. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **160**, 735 (2021).
23. М. В. Жерноклетов, В. К. Грязнов, В. А. Аринин и др., Письма в ЖЭТФ **96**, 479 (2012).
24. V. E. Fortov, R. I. Il'kaev, V. A. Arinin et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).
25. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
26. В. А. Огородников, А. Г. Иванов, А. Л. Михайлов и др., ФГВ **34**, 103 (1998).
27. В. А. Огородников, С. В. Ерунов, А. О. Бликов и др., ЖЭТФ **160**, 621 (2021).
28. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov et al., in *11th IEEE Pulsed Power Conference/Digest of technical papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky (1997), p. 1669.
29. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов и др., *Термодинамические свойства гелия*, ГСССД, Изд-во стандартов, Москва (1984).
30. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recogn. and Image Anal. **19**, 63 (2009).
31. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ. Сер.: Методики и программы численные решения задач математической физики, Вып. 3, 11 (1982).
32. Б. Л. Глушак, Л. Ф. Гударенко, Ю. М. Стяжкин, ВАНТ. Сер.: Математическое моделирование физических процессов, Вып. 2, 57 (1991).
33. И. Р. Трунин, С. В. Корицкая, В. Арнолд, Препринт 75-2000, Саров (2000); S. V. Koritskaya, I. R. Trunin, and W. Arnold, AIP Conf. Proc. **505**, 475 (2000).
34. Б. А. Надикто, А. И. Ломайкин, И. Н. Павлуша, М. О. Ширшова, ВАНТ. Сер.: Теоретическая и прикладная физика, Вып. 2, 43 (2012).
35. А. А. Евстигнеев, М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, ФГВ **12**, 758 (1976).
36. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **159**, 1118 (2021).
37. Р. Ф. Трунин, Л. Ф. Гударенко, М. В. Жерноклетов, Г. В. Симаков, *Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ*, под ред. Р. Ф. Трунина, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (2001).
38. O. T. Strand, D. R. Goosman, C. Martinez et al., Rev. Sci. Instrum. **77**, 083108 (2006).
39. A. V. Chentsov and P. R. Levashov, Contrib. Plasma Phys. **52**, 33 (2012).
40. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
41. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
42. В. Е. Фортов, *Термодинамика динамических воздействий на вещество*, Физматлит, Москва (2019).
43. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова и др., Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972).
44. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова и др., ЖЭТФ **69**, 743 (1975).
45. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова и др., ЖЭТФ **75**, 1683 (1978).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ras.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате L^AT_EX или Word, рисунки — в формате EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом. В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате pdf.

5. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюз. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).
7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № P-16-22 (1987).
8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.
6. Все рисунки должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте.
7. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.pdf-файла. Список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер контактного телефона.

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ акад. М. В. САДОВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова